

THESIS / THÈSE

MASTER EN SCIENCES MATHÉMATIQUES

Mécanique quantique : une étude des équations de Schrödinger-Newton

COLLARD, Estelle

Award date:
2012

[Link to publication](#)

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal ?

Take down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

- Mécanique Quantique -
Une étude des équations de Schrödinger-Newton

Mémoire dirigé par A. Füzfa et J. Larena

Collard Estelle

29 mai 2012

*Savoir que l'on ne sait pas est l'attitude d'excellence.
Croire que l'on sait est la maladie du savoir.
-Lao Tseu-*

*Je tiens à remercier André Füzfa pour son soutien
et son suivi tout au long de ce mémoire,
ainsi que Julien Larena pour ses inspirations
et son accueil en terre africaine.
-Estelle Collard-*

Abstract

This thesis is a study of the Schrödinger-Newton (SN) equations in the particular case of two particles. These SN equations were initially introduced by Penrose [8, 12] to replace the traditional Schrödinger equation and explain the collapse of the wave function at macroscopic scales. Penrose added gravitational self-interactions to the quantum systems by means of a Poisson equation.

Solutions of these SN equations have been studied in the past [9, 10, 11] but only for one particle. Some of the numerical results have been reproduced in this thesis for the spherically symmetric stationary case. They show that there is a discrete infinity of stationary solutions associated with higher and higher energies. The ground solution has no zero, the lowest energy and has been proved in other papers [10] to be the only stable state. The n -th solution has higher energy and n zeros. In this thesis, the influence of the mass has been considered and shown to be consistent with Penrose's assumption that the SN equations link the quantum and macroscopic worlds. Indeed, the ground state, dimensionned according to the mass, leads to extremely well localised heavy objects and completely unlocalised quantum particles. The transition between the quantum and macroscopic worlds appears to be at a scale of approximately 10^{-18} kg, which may allow experimental test of the theory.

A study for two particles has then been started in this thesis, although the expression of the SN equations for multiple particles is subject to discussion. Two expressions have been studied here. The first, proposed specially for this thesis, is inspired by the center of mass decomposition of the Schrödinger equations to which self-interactions have been added. The second expression comes from Diosi's formulation of the SN equations [15, 17]. This formulation has never been numerically studied before in the multiple particles case. These two approaches have been considered for the spherically symmetric case. Different stationary solutions have been found, associated with increasing energy. Once again, the state with the lowest energy is the collapsed one, suggesting it should be the most stable. The results for the two expressions are similar, although Diosi's expression is associated with a more located state and lower energy.

Finally, a study of system with angular momentum has been attempted.

Résumé

Ce mémoire se veut une étude des équations de Schrödinger-Newton (SN) dans le cas de deux particules. Ces équations de SN furent initialement introduites par Penrose [8, 12] pour remplacer la traditionnelle équation de Schrödinger et expliquer la décohérence de la fonction d'onde aux échelles macroscopiques. Penrose ajouta des auto-interactions gravitationnelles aux systèmes quantiques, au moyen d'une équation de Poisson, pour forcer cette décohérence.

Plusieurs études [9, 10, 11] se sont déjà penchées sur les solutions des équations de SN, mais toujours dans le cas d'une seule particule. Quelques uns de leurs résultats numériques sont reproduits dans ce mémoire pour le cas de la symétrie sphérique. Ils montrent qu'il existe une infinité discrète de solutions stationnaires associées à des énergies de plus en plus élevées. La solution fondamentale présente l'énergie la plus faible et ne possède pas de zéro. D'autres papiers [10] ont démontré que cet état fondamental est la seule solution stable. De manière générale, la n -ème solution possède n zéros et une énergie plus élevée. Dans ce mémoire, l'influence de la masse a été étudiée et semble confirmer l'hypothèse de Penrose selon laquelle les équations de SN forment un lien entre les mondes quantiques et macroscopiques. En effet l'état fondamental, dimensionné selon la masse, montre que les objets lourds sont extrêmement bien localisés alors que les particules quantiques s'avèrent non localisées. La transition entre les mondes quantique et macroscopique se situe pour des masses de l'ordre de 10^{-18} kg.

Une étude pour deux particules a été commencée dans ce mémoire, bien que l'expression des équations de SN pour plusieurs particules soit sujette à discussion. Deux expressions sont donc étudiées ici. La première, proposée spécialement pour ce mémoire, s'inspire de la décomposition selon le centre de masse de l'équation de Schrödinger ; décomposition à laquelle des auto-interactions sont ajoutées. La seconde expression provient de la formulation des équations de SN proposée par Diosi [15, 17] ; et cette formulation n'a jamais été étudiée numériquement pour plusieurs particules. Ces deux approches furent considérées dans le cas de la symétrie sphérique. Différentes solutions stationnaires ont été trouvées, associées à des énergies de plus en plus grandes ; la solution avec l'énergie la plus faible étant à nouveau l'état fondamental, suggérant que cet état est le plus stable. Les résultats des deux expressions sont de forme et d'ordre de grandeur semblables, bien que l'expression de Diosi présente une énergie plus faible et un état plus localisé.

Pour finir, une étude du système avec moment cinétique fut entreprise.

Table des matières

Introduction	5
I La mécanique quantique et ses limites	6
1 Une expérience de pensée	7
1.1 Au niveau macroscopique	7
1.2 Au niveau microscopique	9
2 Premiers concepts	11
2.1 Notations	11
2.2 Observables	13
2.3 Probabilités	17
2.4 Espace de Hilbert équipé	21
3 Le problème de la mesure	23
3.1 Retour aux sources	23
3.2 Cohérence et décohérence	24
3.3 Principe d'incertitude d'Heisenberg	28
3.4 Limites de la théorie	29
II Les équations de Schrödinger-Newton	31
4 Une alternative à l'équation de Schrödinger	32
4.1 L'équation de Schrödinger sous la loupe	32
4.2 Le chat de Schrödinger à la sauce Penrose	35
5 Etude pour une particule	39
5.1 Expression des équations	39
5.2 Etude numérique	43
6 Etude pour deux particules	55
6.1 Décomposition selon le centre de masse	55
6.2 Décomposition selon les particules	69
7 Ajout de moment cinétique	74
7.1 Pour l'équation de Schrödinger	74
7.2 Pour les équations de Schrödinger-Newton	75
7.3 Etude numérique	83

Conclusions et perspectives	92
Annexes	95
A Décomposition selon le centre de masse	95
B Décomposition selon les particules	99
Bibliographie	103

Introduction

Ce mémoire se veut à la fois une introduction aux problématiques de la mécanique quantique et une étude approfondie des équations de Schrödinger-Newton. C'est pourquoi nous l'avons divisé en deux parties indépendantes.

Les trente premières pages de ce travail consistent en une révision rapide et théorique de la mécanique quantique ; de ses postulats à ses limites, en passant par la notation bra-ket. Le novice y trouvera toutes les notions nécessaires pour appréhender la deuxième partie de ce document. Nous y introduirons également la fameuse équation de Schrödinger qui gouverne l'évolution temporelle des systèmes quantiques. Nous y verrons que les lois qui régissent les phénomènes quantiques contredisent notre bon sens habituel. Le monde des particules quantiques et le monde à notre échelle macroscopique semblent en effet inconciliables.

Dans la seconde partie de ce mémoire, nous tenterons justement de concilier ces deux mondes au moyen d'une variante de l'équation de Schrödinger : les équations de Schrödinger-Newton, introduites par Penrose. Ce dernier eut l'idée d'associer une équation de Poisson à l'équation de Schrödinger pour ajouter des auto-interférences de type gravitationnel aux systèmes quantiques. Nous allons étudier ces équations pour une particule libre (c'est-à-dire libre de tout potentiel autre que les auto-interactions) et constater que les résultats s'avèrent prometteurs. En effet, la solution stationnaire d'énergie minimale, que nous appellerons état fondamental, nous indique que les particules macroscopiques (c'est-à-dire dont la masse est de l'ordre du kilo) sont extrêmement bien localisées. Autrement dit, lorsque nous mesurons la position de tels objets, la probabilité de les trouver déplacés est si petite qu'on les mesurera toujours à la même place. Ce résultat est cohérent avec notre perception du monde macroscopique : sans action extérieure, un corps reste sur place. Pour un objet quantique par contre nous obtiendrons un état fondamental très étendu, signifiant que cet objet n'est absolument pas localisé. Pour un électron par exemple, il existe une probabilité non nulle de le trouver à l'autre bout de l'univers observable. Bien sûr, ces résultats sont théoriques, car notre électron est considéré comme une particule libre de toute interaction, exception faite de son auto-interaction. Néanmoins, ces résultats sont prometteurs.

La suite du mémoire s'éloigne des sentiers battus avec l'étude des équations de Schrödinger-Newton pour deux particules. Or ces équations n'ont jamais jusqu'ici été étudiées numériquement pour ce cas à plusieurs particules, même leur expression est sujette à discussion. Dans ce travail, nous considérerons deux expressions. La première est une proposition originale pour ce mémoire et consiste en une décomposition selon le centre de masse de l'équation de Schrödinger à laquelle nous ajoutons des auto-interactions. Nous verrons que cette expression mène à une étude numérique assez similaire au cas à une particule.

La deuxième expression provient de la formulation de Diosi ; ce dernier propose une expression intégrale des équations de Schrödinger-Newton pour plusieurs particules à laquelle nous adjoignons une décomposition selon les particules. Bien que cette formulation ait été discutée dans la littérature, elle n'a jamais été numériquement étudiée. Nous verrons que ces deux approches nous donnent des résultats de forme et d'ordre de grandeur similaires ; du moins pour deux particules de masses égales.

Enfin, nous nous intéresserons aux équations de Schrödinger-Newton avec l'ajout de moment cinétique. Une telle expression pour deux particules nous permettrait d'étudier un système de deux particules en orbite l'une autour de l'autre. Cet objectif s'est avéré un peu trop enthousiaste. Dans ce mémoire, nous nous pencherons uniquement sur le cas à une particule qui présente déjà des difficultés numériques. Mais avant d'en arriver là, commençons par introduire les concepts de base avec la première partie de ce mémoire.

Première partie

La mécanique quantique et ses limites

Chapitre 1

Une expérience de pensée

La mécanique quantique s'est développée à la suite d'expériences que la physique classique n'était pas capable d'expliquer.

Déjà au XIX^{ème} siècle, les physiciens mettaient en évidence des caractéristiques à la fois corpusculaires et ondulatoires de la lumière. Au début du XX^{ème} siècle, la communauté scientifique a admis que la nature de la lumière n'était *ni ondulatoire, ni corpusculaire*, mais un mélange des deux. Entre-temps, d'autres expériences ont prouvé que les particules microscopiques, comme les électrons, possédaient également cette double nature. Pour expliquer ces phénomènes liés aux particules microscopiques, une nouvelle théorie devait voir le jour : *la mécanique quantique*.

Pourtant, cette théorie ne résout pas tous les problèmes. Il existe des incertitudes inhérentes aux dispositifs expérimentaux, notamment la fameuse incertitude d'Heisenberg. De plus, la mécanique quantique renonce à expliquer les comportements et trajectoires des objets microscopiques, pour ne s'attacher qu'à des prévisions probabilistes. Enfin, les expériences quantiques nous apprennent que l'acte de la mesure perturbe les systèmes. C'est ce qu'on appelle *le problème de la mesure*.

Mais avant, il est nécessaire d'introduire les concepts fondamentaux de cette nouvelle mécanique. Pour ce faire, nous privilégierons une approche intuitive en nous basant sur une expérience de pensée : la fameuse *expérience des deux fentes*. Cette simple expérience permettra, dans un premier temps, de définir les postulats fondamentaux de la mécanique quantique et, dans un deuxième temps, de comprendre d'où vient le problème de la mesure.

L'expérience des deux fentes, inspirée des *fentes de Young* et décrite en détail par Feynman [1], résume les différences entre le domaine macroscopique, où règne la physique classique, et le domaine microscopique, où les résultats défient le bon sens. Pour comprendre ces différences, nous allons réaliser cette expérience avec des objets macroscopiques (comme des balles et des ondes évoluant dans l'eau) puis avec des objets microscopiques (comme des électrons et de la lumière).

Les dispositifs macroscopiques n'ont jamais été mis en place car la mécanique classique suffit à en décrire l'évolution. En ce qui concerne l'expérience microscopique, nous nous contenterons d'en décrire les résultats et les effets via un schéma simplifié.

1.1 Au niveau macroscopique

Imaginons un dispositif qui envoie des balles vers une plaque percée de deux fentes ayant la même largeur que les projectiles. Le tir n'étant pas très précis, les balles peuvent passer par l'une ou l'autre fente ou encore ricocher sur la paroi. Nous nous intéressons aux balles qui parviennent à franchir l'obstacle. Plaçons une plaque d'arrêt de l'autre côté, parallèlement à la plaque percée, ainsi qu'un détecteur pour enregistrer les probabilités de présence des balles. Les probabilités sont calculées en comptant le nombre de balles atteignant un point précis par unité de temps. La figure 1.1.(a) représente ce dispositif.

Notons tout d'abord que les balles arrivent au détecteur par « paquets insécables », c'est-à-dire balle par balle, en apportant toujours la même quantité d'énergie.

Puisque les balles suivent une trajectoire déterminée, il est aisé de calculer leur probabilité de présence. Chaque projectile passera *soit par la fente 1, soit par la fente 2*. Sur l'ensemble des balles, un certain nombre sera passé par la fente 1, et le restant sera passé par la fente 2. Les balles passées par la fente 1 se sont distribuées selon une courbe de probabilité de présence P_1 . De la même manière, les balles passées par la fente 2 se sont disséminées le long de la plaque d'arrêt selon une probabilité P_2 .

Pour savoir comment l'ensemble des projectiles se distribuent le long de la plaque d'arrêt, il suffit de considérer la somme des balles passées par la fente 1 et celles passées par la fente 2. Cet ensemble obéit à la probabilité de présence P_{12} qui est la somme des probabilités précédentes :

$$P_{12} = P_1 + P_2$$

La figure 1.1.(b) montre les graphes des probabilités P_1 et P_2 , et la figure 1.1.(c) représente P_{12} .

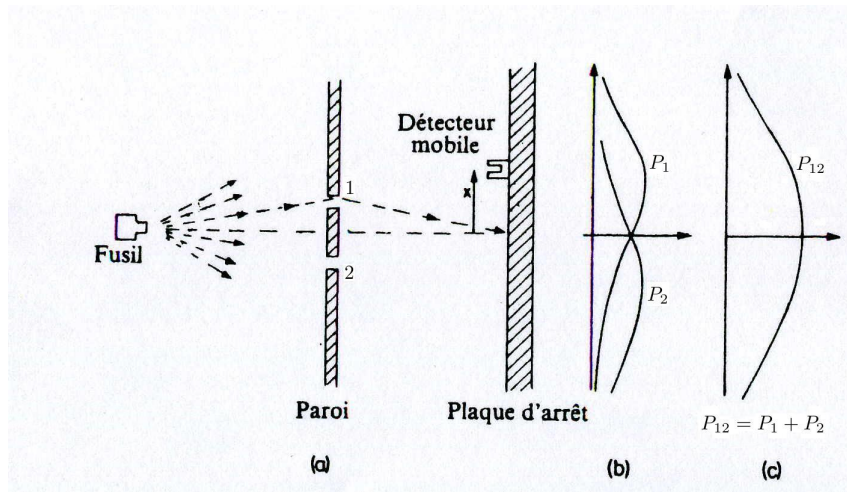


FIGURE 1.1 – Expérience des deux fentes avec des balles - [1]

Exécutons à présent cette expérience avec des ondes. Imaginons que notre plaque percée est placée dans un bassin rempli d'eau. Plaçons une source d'onde (de fréquence ω) à gauche de l'obstacle et un détecteur mobile à droite de l'obstacle. A nouveau, le détecteur se déplace parallèlement à la plaque, comme le montre la figure 1.2.(a). Nous supposons ici que les fentes sont suffisamment « hautes » pour ne pas altérer l'intensité de la vague à son passage.

Dans cette expérience, mesurer la probabilité de présence n'a pas de sens puisque l'onde atteint chaque point du bassin. En revanche, une onde ne porte pas toujours la même quantité d'énergie : la hauteur de la vague varie selon la position du détecteur.

En un point, la hauteur d'une onde de fréquence ω se modélise par une sinusoïde, ou encore en prenant la partie réelle de $he^{i\omega t}$ où $h \in \mathbb{C}$. Notre détecteur mesure l'intensité de la vague, c'est à dire $|h|^2$.

Fermons la fente 2. Quand seule la fente 1 est ouverte, le détecteur va mesurer des variations de l'intensité selon $I_1 = |h_1|^2$, pour une onde $h_1e^{i\omega t}$. Si on ferme la fente 1 en ouvrant la fente 2, le détecteur mesurera une intensité de $I_2 = |h_2|^2$ correspondant à une onde $h_2e^{i\omega t}$.

Lorsque les deux fentes sont ouvertes, le détecteur mesure une intensité I_{12} qui représente une *figure d'interférence* typique pour les ondes. Cette intensité ne s'écrit pas comme la somme des deux précédentes mais comme

$$I_{12} = |h_{12}|^2 = |h_1 + h_2|^2 \neq I_1 + I_2$$

En effet, les amplitudes des ondes de même fréquence s'additionnent, et l'onde devient $(h_1 + h_2)e^{i\omega t}$.

Cette expérience simple permet, à priori, de distinguer les ondes des corpuscules insécables (comme les balles). Les corpuscules sont caractérisés par des intensités égales et se distribuent selon une probabilité de présence, alors que les ondes ont toujours la même probabilité de présence mais leur intensité varie. Soumise à cette expérience, la lumière présente une figure d'interférence et prouve que, à côté de ses

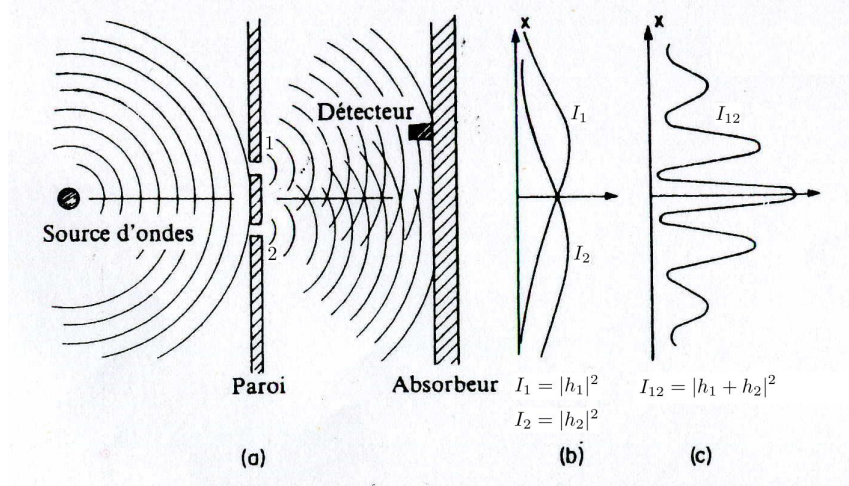


FIGURE 1.2 – Expérience des deux fentes avec des ondes évoluant dans l'eau - [1]

propriétés corpusculaires¹, elle présente des caractéristiques ondulatoires. Nous allons à présent réitérer cette expérience à une échelle microscopique.

1.2 Au niveau microscopique

Nous allons à présent soumettre des électrons à l'expérience des deux fentes. La taille du dispositif doit bien sûr être réduite pour correspondre à la taille des électrons. C'est pourquoi cette expérience ne peut pas être réalisée telle quelle ([2]). Néanmoins, nous ne nous attarderons pas sur cet aspect pratique car seuls les résultats nous intéressent.

Imaginons que nous possédons un canon qui permet d'envoyer des électrons en direction d'une plaque percée de deux fentes. De l'autre côté, un détecteur mobile enregistre les électrons qui l'atteignent, comme illustré sur la figure 1.3.(a).

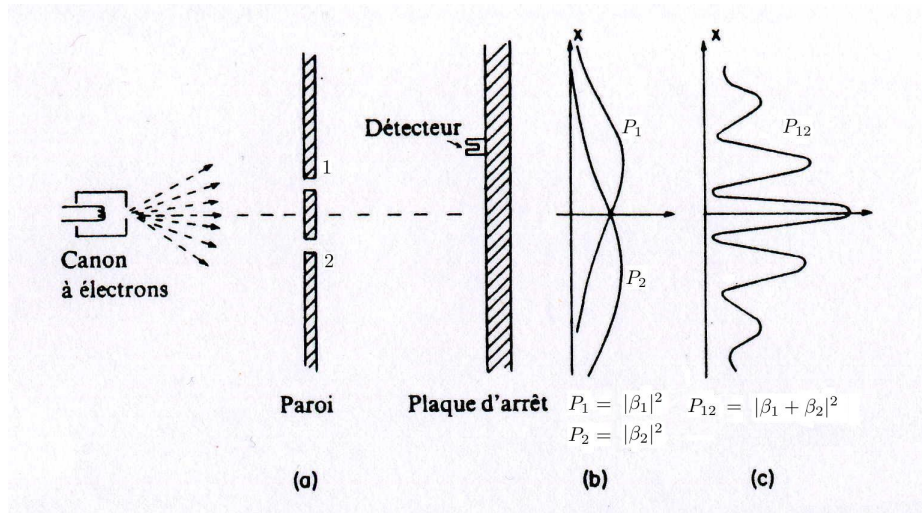


FIGURE 1.3 – Expérience des deux fentes avec des électrons - [1]

1. A partir de l'expérience nommée *effet photoélectrique*, Einstein déduit que la lumière doit être composée de particules insécables de même énergie, ultérieurement nommés photons.

Historiquement, les électrons furent d'abord considérés comme des corpuscules. En effet, ils transportent tous (à peu près) la même énergie. De plus, notre détecteur les enregistre par « paquets insécables ». D'ailleurs, si l'on diminue la cadence d'émission à la source, les électrons arrivent toujours par « paquets » de même intensité ; seule la cadence d'arrivée diminue.

A l'instar de l'expérience avec les balles, nous allons donc mesurer les probabilités de présence en calculant le nombre d'électrons enregistrés par unité de temps. En déplaçant le détecteur, on peut donc tracer la courbe de probabilité P_{12} , représentée à la figure 1.3.(c).

Contre toute attente, le résultat obtenu ressemble à une figure d'interférence.

Nous avons vu que les électrons arrivent par « paquets », il est alors tentant de faire une analogie avec l'expérience des balles. Mais, si un électron (ou un « paquet ») se comporte comme un corpuscule, il faut nécessairement qu'il *soit par la fente 1, soit par la fente 2*. Or cette affirmation peut facilement être réfutée.

En effet, si elle était vérifiée, la probabilité de présence totale devrait être la somme des probabilités individuelles pour les deux fentes, $P_{12} = P_1 + P_2$, comme c'était le cas pour les balles. Pourtant, quand on mesure ces probabilités individuelles, on ne trouve pas cette égalité. Au contraire, on retrouve les mêmes graphes que ceux de l'expérience sur les ondes (voir figure 1.2). C'est comme s'il y avait des *interférences*. Cette constatation permet d'écrire les relations entre les probabilités :

$$\begin{aligned} P_1 &= |\beta_1|^2 \\ P_2 &= |\beta_2|^2 \\ P_{12} &= |\beta_1 + \beta_2|^2 \end{aligned}$$

avec $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{C}$

La présence d'interférences a soulevé beaucoup de questions. Certains ont avancé l'hypothèse que les électrons ricochent entre eux, pêle-mêle, et créent cette interférence. Diminuons alors la fréquence d'émission jusqu'à ce qu'il n'y ait plus qu'un seul électron à la fois dans le dispositif. A ce stade, les électrons ne peuvent plus ricocher entre eux. Le détecteur reçoit alors les électrons un par un et, petit à petit, ceux-ci se distribuent sur la plaque d'arrêt. La figure 1.4 présente cette plaque d'arrêt en deux dimensions et à différents moments.

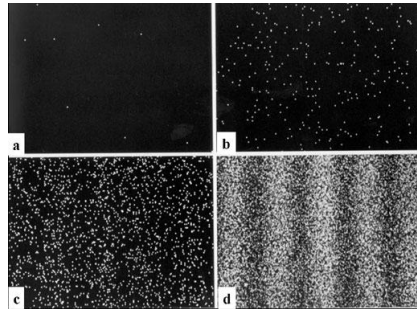


FIGURE 1.4 – Résultat de l'expérience des deux fentes avec des électrons envoyés un par un - [2]

A nouveau, des interférences sont observées. D'où viennent-elles puisque les électrons ne peuvent plus s'entrechoquer ? Que se passe-t-il réellement ?

A ce jour, il n'y a pas de réponse à ces questions. Nous pouvons juste constater que les électrons arrivent par « paquets » et que la probabilité de présence de ces paquets se comporte comme une fonction d'onde. La conclusion, c'est que les électrons (et les objets microscopiques en général, dont la lumière) ne sont *ni des corpuscules, ni des ondes*.

Or, à l'époque où ces expériences ont été réalisées, il n'existait pas de théorie capable d'expliquer ce comportement. Il a donc fallu développer une nouvelle approche : la mécanique quantique.

Avant d'aller plus loin, nous allons introduire les concepts et définitions de base de cette nouvelle théorie. Nous reviendrons alors à l'expérience des deux fentes pour développer le problème de la mesure.

Chapitre 2

Premiers concepts

2.1 Notations

Par définition, l'**état d'un système** regroupe l'ensemble des caractéristiques physiques du système. Il suffit donc de connaître cet état pour pouvoir prédire le résultat d'expériences appliquées au système.

En mécanique classique, l'état d'un système est déterminé par les vecteurs position et vitesse des particules ou encore par leurs coordonnées généralisées q et p .

La mécanique quantique travaille à partir de postulats. La modélisation de l'état fait d'ailleurs l'objet du premier postulat ([7]) :

Postulat 1 (Vecteur d'état) *Tout système quantique se modélise par un espace de Hilbert complexe séparable \mathbb{H} . Tout état possible est représenté par un vecteur unitaire $\Psi \in \mathbb{H}$. De même, à chaque vecteur unitaire correspond un état quantique possible. Nous verrons par la suite que cette condition de normalité sur les vecteurs d'état est imposée par l'interprétation probabiliste de la mécanique quantique (cfr section 2.3).*

Tout multiple $a\Psi$, où a est un nombre complexe de module 1, représente le même état quantique que Ψ . Cela signifie que les mesures ne permettent pas de différencier $a\Psi$ de Ψ .

On peut alors considérer qu'à tout état quantique correspond un « rayon » :

$$\{e^{i\alpha}\Psi, \alpha \in \mathbb{R}; \Psi \in \mathbb{H}; \|\Psi\| = 1\}$$

Ce postulat a une conséquence importante appelée **principe de superposition**. Comme \mathbb{H} est un espace vectoriel, cela signifie que la somme de deux états $\Psi_1, \Psi_2 \in \mathbb{H}$ est encore un état.

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 \in \mathbb{H}$$

On retrouve cette superposition dans l'expérience des deux fentes : il y a deux sortes d'état pour l'électron.

- L'état Ψ_1 où l'électron passe par la fente 1.
- L'état Ψ_2 où l'électron passe par la fente 2.

Quand on ne connaît pas le chemin de l'électron, on considère que les deux possibilités sont valides *en même temps* ; l'électron *peut passer* par la fente 1 comme il *peut passer* par la fente 2. Son état est alors une superposition linéaire des deux états quantiques possibles : $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$.

Revenons à l'espace \mathbb{H} des vecteurs d'état. Il existe deux sortes d'espaces de Hilbert utilisés dans la mécanique quantique, $L^2(\mathbb{R}^3)$ et $l^2(\infty)$, qui sont respectivement hérités de la mécanique des ondes et des matrices.

- Dans la **représentation de Schrödinger**, l'état est fonction des coordonnées canoniques q (souvent la position) et du temps t : $\Psi(q, t)$. L'espace \mathbb{H} est celui des fonctions de $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ de carré sommable : $L^2(\mathbb{R}^3)$ ou encore $L^2(\mathbb{R}^{3n})$ s'il y a n particules. Cet espace est muni du produit scalaire suivant :

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \int \overline{\Psi(q, t)} \Phi(q, t) dq = \overline{\langle \Phi | \Psi \rangle} \quad (2.1)$$

où $\overline{\Psi}$ représente le conjugué complexe de Ψ .

- Dans la **représentation d’Heisenberg**, l’état est considéré indépendant du temps : $\Psi(q)$. Nous reviendrons plus tard sur l’interprétation d’une telle indépendance. L’espace \mathbb{H} est ici $l^2(\infty)$, l’espace des suites de carré sommable : $u = (u_n)_{n \in \mathbb{N}}$, $u_n \in \mathbb{C}$. Le produit scalaire entre deux suites u et v s’écrit

$$\langle u|v \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} u_n v_n$$

Ces représentations sont équivalentes puisque tout espace de Hilbert séparable est isomorphe à $l^2(\infty)$. Dans ce mémoire, nous nous placerons principalement dans la représentation de Schrödinger.

Introduisons à présent la **notation de Dirac** qui sera beaucoup utilisée par la suite ([6, 7]). Tout d’abord, quelques définitions sont nécessaires :

Définition 1 Une fonction ψ est une **fonction test** si elle est infiniment continûment différentiable et si elle s’annule hors d’un borné de \mathbb{R}^n . L’ensemble des fonctions test s’écrit $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$.

Définition 2 La **dual topologique** V' d’un espace normé V est l’ensemble des fonctionnelles linéaires continues (et donc bornées) sur V . L’**antidual topologique** V^\times est l’ensemble des fonctionnelles antilinéaires et continues sur V . Lorsque $V = \mathcal{D}$, les éléments de son dual \mathcal{D}' sont appelées **distributions**.

Le produit scalaire (2.1) peut être vu sous la forme d’une fonctionnelle antilinéaire s’appliquant à des fonctions ψ :

$$\langle \psi|\Phi \rangle = \int \overline{\psi(q,t)} \Phi(q,t) dq = F_\Phi(\psi)$$

où ψ doit appartenir à $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$. Alors la fonctionnelle antilinéaire et continue

$$F_\Phi(\bullet) := \langle \bullet|\Phi \rangle$$

appartient à l’antidual topologique de \mathcal{D} . On dira que le **ket** $|\Phi \rangle$ appartient à \mathcal{D}^\times et s’applique à des **bras** $\langle \psi|$ de \mathcal{D} .

$$F_\Phi \rightsquigarrow |\Phi \rangle$$

$$\psi \rightsquigarrow \langle \psi|$$

Le produit scalaire s’interprète alors comme l’association d’un vecteur bra et d’un vecteur ket. Il faut donc ajouter à l’espace de Hilbert \mathbb{H} les espaces \mathcal{D} et \mathcal{D}^\times qui définissent ces vecteurs.

Outre l’espace des états \mathbb{H} , le formalisme de Dirac nécessite d’introduire des espaces supplémentaires pour permettre la manipulation d’entités comme les bras, les kets, la distribution de Dirac ou encore les observables (que nous verrons par la suite). On devra parler d’**espace de Hilbert équipé** :

$$\mathcal{D} \subset \mathbb{H} \subset \mathcal{D}^\times$$

Mais le produit scalaire peut également être vu comme une fonctionnelle linéaire s’appliquant à $\phi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$:

$$\langle \Psi|\phi \rangle = \int \overline{\Psi(q,t)} \phi(q,t) dq = F_\Psi(\phi)$$

La distribution $\langle \Psi|\bullet \rangle = F_\Psi(\bullet)$ définit le vecteur **bra** $\langle \Psi|$ appartenant au dual topologique de \mathcal{D} et s’appliquant à des **kets** $|\phi \rangle$ de \mathcal{D} .

$$F_\Psi \rightsquigarrow \langle \Psi|$$

$$\phi \rightsquigarrow |\phi \rangle$$

Dans cette représentation, équivalente à la première, on utilisera le triplet d’espaces :

$$\mathcal{D} \subset \mathbb{H} \subset \mathcal{D}'$$

On peut également passer facilement du vecteur $|\Psi \rangle$ au vecteur $\langle \Psi|$ car ils sont conjugués transposés :

$$|\Psi \rangle^\dagger = \langle \Psi|$$

Maintenant nous savons quelle est l'origine des vecteurs bra et ket. A ce stade, bon nombre de références disent simplement que le ket $|\Phi\rangle$ représente l'état Φ du système, mais la réalité est un peu plus complexe. En effet, le vecteur Φ est fonction des variables canoniques q et du temps t alors que $|\Phi\rangle$ ne dépend que du temps. Néanmoins, nous allons accepter ce raccourci de langage pour le moment. Une fois que nous aurons vu la notion d'opérateur, nous développerons plus en détail le lien existant entre la fonction Φ et le vecteur $|\Phi\rangle$.

2.2 Observables

En mécanique classique, il n'existe pas de différence entre un observable et une variable. Par exemple, la position x d'un objet est une **grandeur**, ce qu'on appelle aussi **observable**. Mais la position est également une **variable** car elle peut être mesurée. Sa valeur donne directement la valeur de la grandeur « position ». Et comme l'état classique se détermine avec la position et la vitesse, toutes les deux mesurables, il est possible de caractériser l'état d'un système classique.

En mécanique quantique, il n'est pas possible de mesurer directement une grandeur comme la position. Il faut d'abord lui adjoindre un correspondant, comme l'explique le postulat 2.

Postulat 2 (Mesure quantique) *Toute grandeur physique, ou observable, A se modélise par un opérateur linéaire hermitien \hat{A} agissant dans \mathbb{H} . Les résultats de la mesure sont les valeurs propres (réelles car \hat{A} est hermitien) de cet opérateur. Toute mesure ne peut fournir que ces valeurs propres.*

On comprend ainsi qu'il n'est pas possible de mesurer directement l'état quantique Ψ . De même deux états différents peuvent donner un même résultat lors d'une mesure. Ce n'est pas tout : nous verrons au postulat 6 les conséquences de l'acte de mesure sur l'état Ψ . Mais pour l'instant, rappelons la définition et les propriétés d'un opérateur hermitien :

Définition 3 On définit l'**adjoint** \hat{A}^\dagger d'un opérateur \hat{A} par

$$\langle \Psi | \hat{A} \Phi \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \Psi | \Phi \rangle \quad \forall \Psi, \Phi \in \mathbb{H}$$

Un opérateur \hat{A} est **hermitien** (ou **auto-adjoint**) si $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, c'est à dire si

$$\langle \Psi | \hat{A} \Phi \rangle = \langle \hat{A} \Psi | \Phi \rangle \triangleq \langle \Psi | \hat{A} | \Phi \rangle \quad \forall \Psi, \Phi \in \mathbb{H}$$

Le caractère hermitien de l'opérateur dépend donc de l'espace \mathbb{H} et du produit scalaire sur cet espace. Par la suite, on écrira souvent $\hat{A}|\Psi\rangle$, signifiant que l'opérateur s'applique directement à l'« état » $|\Psi\rangle$.

Proposition 1 *Les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles, et les vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes sont orthogonaux.*

Revenons maintenant aux observables : le postulat 2 nous dit qu'il existe un opérateur pour tout observable (même si la réciproque n'est pas toujours vraie). Le tableau suivant donne quelques exemples de quantités classiques avec leur correspondants quantiques ([4] p.371).

position à une dimension	x	\hat{x}
position	r	\hat{r}
moment à une dimension	$p = m\dot{x}$	$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
moment	$p = m\dot{r}$	$\hat{p} = -i\hbar \nabla$
hamiltonien	$H(r, p) = \frac{p^2}{2m} + U$	$\hat{H}(\hat{r}, \hat{p}) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}$

où m représente la masse du corps considéré et \hbar est la constante de Planck réduite¹ :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054571628 \cdot 10^{-34} \text{ [kg m}^2 \text{ s}^{-1}] \text{ ([14])}.$$

Il existe une sorte de **règle de construction** pour définir l'opérateur correspondant à un observable. Soit un observable classique $f(x, p)$, fonction de la position et du moment en une dimension. Son opérateur sera noté $\hat{f}(\hat{x}, \hat{p})$ et construit de la manière suivante :

$$\hat{f}(\hat{x}, \hat{p}) = f\left(\hat{x}, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Cet opérateur n'est pas toujours hermitien, il faut alors lui appliquer une « symétrisation » pour obtenir un opérateur hermitique ([3]). Par exemple, supposons que l'on souhaite modéliser la grandeur physique

$$A = r \cdot p = xp_x + yp_y + zp_z$$

En mécanique quantique, l'opérateur

$$\hat{A} = \hat{r} \cdot \hat{p} = \hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z$$

ne sera pas hermitien. On choisira alors l'opérateur

$$\hat{A} = \frac{1}{2}(\hat{r} \cdot \hat{p} + \hat{p} \cdot \hat{r})$$

pour représenter la grandeur A .

Considérons maintenant **la mesure** proprement dite. Mesurer la grandeur A revient à appliquer son opérateur sur l'état du système quantique : $\hat{A}|\Psi\rangle$. Le résultat de la mesure est une des valeurs propres de l'opérateur \hat{A} ; ce qui signifie que le spectre de \hat{A} , $\sigma(\hat{A})$, recouvre l'ensemble des résultats possibles de la mesure. Ce spectre peut être discret ou continu et cette distinction mène à quelques différences d'écriture ([3]).

- Considérons tout d'abord le cas d'un **spectre discret**, c'est-à-dire dont les éléments sont en bijection avec \mathbb{N} :

$$\sigma(\hat{A}) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots\}$$

- Si aucune des valeurs propres n'est dégénérée, il existe un vecteur propre $|\phi_n\rangle$ correspondant à chaque valeur propre.

$$\hat{A}|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_n\rangle$$

Les développements ci-dessous sont hérités directement de la théorie des matrices hermitiennes où les vecteurs propres forment une base de l'espace. Ainsi, l'état de départ $|\Psi\rangle$ est une combinaison linéaire des vecteurs propres (normés) de \hat{A} :

$$|\Psi\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}_0} a_n |\phi_n\rangle = \sum_n \langle \phi_n | \Psi \rangle |\phi_n\rangle \quad (2.2)$$

avec $a_n = \langle \phi_n | \Psi \rangle \in \mathbb{C}$. On peut alors dire que les vecteurs propres (une fois normés) forment une base de \mathbb{H} :

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn} \text{ et } \|\phi_n\| = 1$$

La condition de normalisation du postulat 1 impose que :

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_n |a_n|^2 = 1$$

1. Les unités sont notées entre crochets pour éviter de confondre la masse m avec les mètres $[m]$.

Grâce à l'équation (2.2), un opérateur avec un spectre discret peut se réécrire :

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_n \lambda_n |\phi_n\rangle a_n = \sum_n \lambda_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \Psi \rangle$$

De manière plus succincte, on peut voir \hat{A} comme une superposition de projections P_n sur le sous-espace propre de λ_n :

$$\hat{A} = \sum_n \lambda_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \sum_n \lambda_n P_n$$

Où l'opérateur $P_n = |\phi_n\rangle \langle \phi_n|$ est un projecteur hermitien : $P_n^2 = P_n$ et $P_n^\dagger = P_n$.

La relation d'idempotence, $P_n^2 = P_n$, s'interprète facilement. En effet, la projection de $|\Psi\rangle$ sur le $n^{\text{ème}}$ sous-espace propre nous donne ϕ_n . Le vecteur ϕ_n étant déjà dans son espace-propre, une projection ultérieure le laissera inchangé.

$$P_n^2|\Psi\rangle = P_n P_n|\Psi\rangle = P_n \phi_n = \phi_n = P_n|\Psi\rangle$$

Finalement, l'équation (2.2) mène à la **relation de fermeture** :

$$\mathbb{I} = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \sum_n P_n \quad (2.3)$$

- Supposons maintenant que les valeurs propres puissent être **dégénérées**. La valeur propre λ_n de multiplicité géométrique g_n possède plusieurs vecteurs propres (orthonormés) $|\phi_n^k\rangle$:

$$\hat{A}|\phi_n^k\rangle = \lambda_n |\phi_n^k\rangle \quad k = 1, 2, \dots$$

L'état peut alors se décomposer comme :

$$|\Psi\rangle = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} a_n^k |\phi_n^k\rangle = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} \langle \phi_n^k | \Psi \rangle |\phi_n^k\rangle \quad (2.4)$$

On obtient de nouveau une **relation de fermeture** :

$$\mathbb{I} = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} |\phi_n^k\rangle \langle \phi_n^k| \quad (2.5)$$

Et tout opérateur s'écrit comme une projection sur les sous-espaces propres, ceux-ci ayant plusieurs dimensions :

$$\hat{A} = \sum_n \lambda_n \sum_{k=1}^{g_n} |\phi_n^k\rangle \langle \phi_n^k| = \sum_n \lambda_n P_n$$

Dans cette formule, il est moins aisé de se rendre compte que P_n est bien un projecteur sur le sous-espace propre de λ_n . Mais il suffit de quelques manipulations pour se convaincre. Considérons l'état Ψ de départ de l'équation (2.4). Sélectionnons alors la partie de Ψ qui appartient à l'espace propre de λ_n :

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{k=1}^{g_n} a_n^k |\phi_n^k\rangle = \sum_{k=1}^{g_n} \langle \phi_n^k | \Psi \rangle |\phi_n^k\rangle \quad (2.6)$$

Or, $|\Psi_n\rangle$ est la projection de $|\Psi\rangle$ sur l'espace propre de λ_n , c'est-à-dire $|\Psi_n\rangle = P_n|\Psi\rangle$. Et on retrouve bien l'expression du projecteur :

$$P_n = \sum_{k=1}^{g_n} |\phi_n^k\rangle \langle \phi_n^k|$$

On comprend également que le choix de la base $\{|\phi_n^k\rangle\}_{k=1}^{g_n}$ du sous-espace propre ne changera pas la décomposition de $|\Psi\rangle$ ni celle de \hat{A} puisque leurs expressions sont reliées aux projecteurs P_n et non aux vecteurs propres $|\phi_n^k\rangle$.

- Dans le cas d'un **spectre continu**, il n'est plus possible de parler d'espace propre. Nous ne traiterons que le cas **non dégénéré** où chaque valeur propre λ aura un vecteur propre $|\phi_\lambda\rangle$:

$$\hat{A}|\phi_\lambda\rangle = \lambda|\phi_\lambda\rangle \quad (2.7)$$

Les kets $|\phi_\lambda\rangle$ sont une généralisation des vecteurs propres au cas continu. L'état $|\Psi\rangle$ peut à nouveau se décomposer dans une « base des vecteurs propres » :

$$|\Psi\rangle = \int a_\lambda |\phi_\lambda\rangle d\lambda = \int \langle\phi_\lambda|\Psi\rangle |\phi_\lambda\rangle d\lambda \quad (2.8)$$

où $|\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda| d\lambda$ est la mesure spectrale. La **relation de fermeture** s'exprime :

$$\mathbb{I} = \int |\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda| d\lambda \quad (2.9)$$

A nouveau, l'opérateur \hat{A} peut se décomposer selon ses vecteurs propres :

$$\hat{A} = \int \lambda |\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda| d\lambda \quad (2.10)$$

L'orthonormalité des vecteurs propres mérite quelques éclaircissements dans le cas continu. Considérons deux vecteurs propres ϕ_λ et $\phi_{\lambda'}$ associés aux valeurs propres λ et λ' . Leur produit scalaire vaut :

$$\langle\phi_\lambda|\phi_{\lambda'}\rangle = \delta_{\lambda-\lambda'}$$

où $\delta_{\lambda-\lambda'}$ est la **distribution de Dirac** telle que, pour une fonction f continue, on ait :

$$\int f(\lambda) \delta_{\lambda-\lambda'} d\lambda = f(\lambda')$$

Ainsi lorsqu'on applique \hat{A} au vecteur propre $|\phi_{\lambda'}\rangle$, on obtient :

$$\hat{A}|\phi_{\lambda'}\rangle = \int \lambda |\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda|\phi_{\lambda'}\rangle d\lambda = \int \lambda |\phi_\lambda\rangle \delta_{\lambda-\lambda'} d\lambda = \lambda' |\phi_{\lambda'}\rangle$$

Et on retrouve l'équation (2.7).

Nous avons repris ci-dessus des opérateurs typés en supposant que tout leur spectre était soit continu soit discret. Mais il arrive que le spectre d'un opérateur \hat{A} soit un mélange des deux. Les décompositions doivent alors s'additionner selon la forme du spectre.

Par exemple, considérons l'opérateur mesurant l'énergie d'un atome d'hydrogène. Lorsque les états sont liés, c'est-à-dire quand l'électron « orbite » autour du proton, le spectre est discret non dégénéré. Et lorsque les états ne sont pas liés, c'est-à-dire quand l'électron est éloigné du proton, le spectre est continu non dégénéré. L'état d'un tel atome s'écrit donc en combinant les deux spectres :

$$|\Psi\rangle = \sum_n \langle\phi_n|\Psi\rangle |\phi_n\rangle + \int \langle\phi_\lambda|\Psi\rangle |\phi_\lambda\rangle d\lambda$$

Finalement, on notera l'importance du choix de l'opérateur dans les formules. Selon l'opérateur choisi, il y aura des **représentations** différentes. Par exemple :

- Représentation $|\phi_\lambda\rangle$ selon le spectre de \hat{A} : $\mathbb{H} = L^2(\sigma(\hat{A}), d\lambda)$ où

$$\hat{A} = \int_{\sigma(A)} \lambda |\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda| d\lambda$$

- Représentation $|\phi_x\rangle$ selon le spectre de \hat{x} , l'opérateur mesurant la position : $\mathbb{H} = L^2(\mathbb{R}, dx)$
- Représentation de Fourier selon le spectre de \hat{p} , l'opérateur de moment : $\mathbb{H} = L^2(\mathbb{R}, dp)$

Maintenant que cette notion d'opérateur est bien définie, nous pouvons revenir à la **notation de Dirac** et au lien réel existant entre la fonction Φ et le ket $|\Phi\rangle$, qui représentent tous les deux l'état d'un système. Dans la section précédente (2.1 Notations), nous étions implicitement dans une certaine représentation : celle des variables canoniques. Ecrivons l'opérateur associé à cette représentation :

$$\hat{q} |\phi_q\rangle = q |\phi_q\rangle$$

où q sont ses valeurs propres et $|\phi_q\rangle$ ses vecteurs propres. On suppose que le spectre de \hat{q} est continu et on connaît alors sa relation de fermeture :

$$\mathbb{I} = \int |\phi_q\rangle \langle \phi_q| dq$$

Rappelons nous que les kets ne dépendent que du temps t et écrivons l'association d'un bra $\langle \Psi|(t)$ et d'un ket $|\Phi\rangle(t)$:

$$\langle \Psi|(t) |\Phi\rangle(t) = \langle \Psi|\Phi\rangle = \langle \Psi|\mathbb{I}|\Phi\rangle$$

En utilisant la relation de fermeture, on trouve :

$$\langle \Psi|(t) |\Phi\rangle(t) = \langle \Psi| \left(\int |\phi_q\rangle \langle \phi_q| dq \right) |\Phi\rangle = \int \langle \Psi|\phi_q\rangle \langle \phi_q|\Phi\rangle dq$$

Nous nous rapprochons tout doucement du produit scalaire vu à la section précédente. Nous devons encore poser une relation unissant la fonction $\Phi(q, t)$ à son ket $|\Phi\rangle$:

$$\begin{aligned} \Phi(q, t) &= \langle \phi_q|\Phi\rangle \\ \overline{\Phi(q, t)} &= \langle \Phi|\phi_q\rangle \end{aligned} \tag{2.11}$$

Autrement dit, lorsqu'on considère $\Phi(q, t)$ comme l'état du système, on se situe déjà dans une représentation particulière. Le ket $|\Phi\rangle(t)$ représente l'état de manière plus générale, affranchi de ses variables canoniques. A présent, nous pouvons clairement relier le produit scalaire aux bra-ket, comme nous l'avons fait à la section précédente.

$$\langle \Psi|(t) |\Phi\rangle(t) = \int \overline{\Psi(q, t)} \Phi(q, t) dq = \langle \Psi(q, t) | \Phi(q, t) \rangle$$

Et on retrouve l'équation (2.1), où nous notions simplement $\langle \Psi|\Phi\rangle$.

Nous avons donc compris que $|\Phi\rangle(t)$ est une notion plus générale que $\Phi(q, t)$ pour parler de l'état d'un système. Ceci dit, la distinction entre ces deux « états » aura peu d'influence sur la suite.

2.3 Probabilités

La mécanique quantique est essentiellement basée sur une approche probabiliste des résultats. Celle-ci est néanmoins assez intuitive.

On sait que seules les valeurs propres d'un opérateur sont mesurables. Tous les résultats possibles de la mesure sont donc connus à priori. Ce qu'on ignore, c'est *le résultat qui sera effectivement rendu*. Comme la mesure ne donnera pas à tous les coups la même valeur, il faut effectuer plusieurs mesures et étudier les probabilités d'apparition de chaque valeur propre.

Justement, la mécanique quantique permet de prédire cette probabilité en faisant intervenir le produit scalaire entre états. Par exemple, la probabilité de passer d'un état $|\Psi\rangle$ à un état $|\Phi\rangle$ se calcule par :

$$\mathcal{P}(\Psi \rightarrow \Phi) = |\langle \Psi|\Phi\rangle|^2$$

Dans le postulat 1, nous avons posé $\langle \Psi|\Psi\rangle = 1$. On comprend maintenant que cela correspond à une probabilité de 1 de passer de l'état $|\Psi\rangle$ à l'état $|\Psi\rangle$. La normalisation était indispensable pour permettre une interprétation probabiliste plus aisée.

Le postulat 1 spécifiait également qu'un état pouvait être représenté indifféremment par Ψ et $e^{i\theta}\Psi$. A nouveau, cela vient des probabilités :

$$\mathcal{P}(\Psi \rightarrow e^{i\theta}\Psi) = |\langle \Psi | e^{i\theta}\Psi \rangle|^2 = |e^{i\theta} \langle \Psi | \Psi \rangle|^2 = 1$$

Les prédictions seront les mêmes pour Ψ ou $e^{i\theta}\Psi$ car

$$|\langle \Phi | e^{i\theta}\Psi \rangle|^2 = |e^{i\theta} \langle \Phi | \Psi \rangle|^2 = |\langle \Phi | \Psi \rangle|^2$$

Autrement dit, deux vecteurs d'état proportionnels par un complexe de module 1 représentent le même état physique. On prendra garde à bien interpréter cette proportionnalité. Par exemple, les vecteurs suivants

$$|\Psi\rangle = |\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle \quad \text{et} \quad |\Phi\rangle = e^{i\theta_1}|\Psi_1\rangle + e^{i\theta_2}|\Psi_2\rangle \quad \text{pour } \theta_1 \neq \theta_2$$

ne sont pas proportionnels car les facteurs de phase sont différents.

Nous voudrions donc étudier les probabilités d'apparition de chaque valeur propre lors de la mesure de l'observable A . Les trois postulats suivants vont nous donner les formules pour calculer ces probabilités. Évidemment, il faudra tenir compte de la forme du spectre de l'opérateur \hat{A} .

- Si le **spectre** de \hat{A} est **discret**, on souhaite calculer la probabilité d'apparition de la valeur propre λ_n . Il faut alors savoir si elle est dégénérée ou non.
- Considérons une valeur propre λ_n **non dégénérée**. Dans l'équation (2.2), on donnait une expression de l'état $|\Psi\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \sum_m a_m |\phi_m\rangle = \sum_m \langle \phi_m | \Psi \rangle |\phi_m\rangle$$

Il est clair que la projection orthogonale de $|\Psi\rangle$ sur le vecteur propre $|\phi_n\rangle$ de λ_n donne :

$$|\Psi_n\rangle = P_n |\Psi\rangle = a_n |\phi_n\rangle = \langle \phi_n | \Psi \rangle |\phi_n\rangle$$

On postule alors que la probabilité d'obtenir la valeur λ_n lors de la mesure de l'état Ψ est donnée par le carré de la norme de cette projection orthogonale. En utilisant le projecteur et ses propriétés ($P_n^2 = P_n$ et $P_n^\dagger = P_n$), on note :

$$\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = \langle P_n \Psi | P_n \Psi \rangle = \langle \Psi | P_n^\dagger P_n \Psi \rangle = \langle \Psi | P_n \Psi \rangle$$

Mais on trouve également :

$$\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = \langle P_n \Psi | P_n \Psi \rangle = \langle P_n^\dagger P_n \Psi | \Psi \rangle = \langle P_n \Psi | \Psi \rangle$$

Puisque les deux écritures sont équivalentes, cette valeur se notera :

$$\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle := \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle$$

Postulat 3 (Interprétation probabiliste pour un spectre discret non dégénéré)

Le résultat de la mesure de l'état $|\Psi\rangle$ par une grandeur A est une des valeurs propres λ_n de l'opérateur correspondant \hat{A} . La probabilité $\mathcal{P}(\lambda_n)$ d'obtenir cette valeur est le carré de la norme de la projection orthogonale de $|\Psi\rangle$ sur le sous-espace propre de λ_n :

$$\mathcal{P}(\lambda_n) = |\langle \phi_n | \Psi \rangle|^2 = |a_n|^2 = \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle \quad (2.12)$$

On remarque que cette probabilité $\mathcal{P}(\lambda_n)$ d'obtenir la valeur propre λ_n a la même expression que la probabilité de passer de l'état $|\Psi\rangle$ à l'état $|\phi_n\rangle$.

$$\mathcal{P}(\Psi \rightarrow \phi_n) = |\langle \phi_n | \Psi \rangle|^2$$

Serait-il possible que mesurer la valeur λ_n entraîne le passage de l'état $|\Psi\rangle$ à l'état $|\phi_n\rangle$? Le lecteur impatient trouvera la réponse au postulat 6.

Enfin, on peut vérifier que la formule (2.12) définit bien une probabilité grâce à la condition de normalité sur Ψ :

$$\sum_n \mathcal{P}(\lambda_n) = \sum_n |a_n|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$$

- Considérons une valeur propre λ_n **dégénérée** et écrivons à nouveau l'état $|\Psi\rangle$ projeté sur le sous-espace propre de λ_n . Cette expression était développée dans l'équation (2.6) :

$$|\Psi_n\rangle = P_n|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{g_n} a_n^k |\phi_n^k\rangle = \sum_{k=1}^{g_n} \langle \phi_n^k | \Psi \rangle |\phi_n^k\rangle$$

La probabilité sera le carré de la norme de $\Psi_n = P_n|\Psi\rangle$:

$$\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = \sum_{k=1}^{g_n} |a_n^k|^2$$

Dans ce cas, la probabilité dépend de la projection de $|\Psi\rangle$ sur le sous-espace propre de λ_n , elle est donc indépendante du choix de la base du sous-espace propre $\{|\phi_n\rangle\}_{i=1}^{g_n}$.

Postulat 4 (Interprétation probabiliste pour un spectre discret dégénéré)

Le résultat de la mesure de l'état $|\Psi\rangle$ par une grandeur A est une des valeurs propres λ_n de l'opérateur correspondant \hat{A} . La probabilité $\mathcal{P}(\lambda_n)$ d'obtenir cette valeur est donnée par le carré de la norme de la projection orthogonale de $|\Psi\rangle$ sur le sous-espace propre de λ_n :

$$\mathcal{P}(\lambda_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \phi_n^i | \Psi \rangle|^2 = \sum_{k=1}^{g_n} |a_n^k|^2 = \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle \quad (2.13)$$

- Si le **spectre** de \hat{A} est **continu** et **non-dégénéré**, il n'est plus possible de mesurer la probabilité d'une seule valeur propre puisqu'il s'agit d'un ensemble de mesure nulle. On cherchera la probabilité que la mesure donne un résultat se situant entre deux valeurs propres λ_1 et λ_2 .

$$\mathcal{P}([\lambda_1, \lambda_2]) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\mathcal{P}(\lambda)$$

Et la densité de probabilité $d\mathcal{P}(\lambda)$ est la probabilité d'obtenir un résultat entre λ et $\lambda + d\lambda$. A nouveau, son expression sera liée au vecteur propre associé à λ . Nous avons déjà défini l'état à l'équation (2.8) comme :

$$|\Psi\rangle = \int a_\lambda |\phi_\lambda\rangle d\lambda = \int \langle \phi_\lambda | \Psi \rangle |\phi_\lambda\rangle d\lambda$$

Par similitude avec ce qui a été fait précédemment, la densité de probabilité est définie grâce à la projection sur « le sous-espace propre » :

Postulat 5 (Interprétation probabiliste pour un spectre continu non dégénéré) *La densité de probabilité $d\mathcal{P}(\lambda)$ que la mesure A donne un résultat entre λ et $\lambda + d\lambda$ se calcule par :*

$$d\mathcal{P}(\lambda) = |\langle \phi_\lambda | \Psi \rangle|^2 d\lambda = |a_\lambda|^2 d\lambda \quad (2.14)$$

Et on peut vérifier que cette formule donne bien une probabilité :

$$\mathcal{P}([-\infty, +\infty]) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathcal{P}(\lambda) = \int |a_\lambda|^2 d\lambda = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1$$

Revenons à présent aux expériences quantiques. Étant donné que les prédictions de la mécanique quantique sont probabilistes, il faudrait réaliser N expériences avec $N \rightarrow \infty$ pour que les résultats vérifient la théorie. Or nous ne pouvons réaliser qu'un nombre fini d'expériences, il faut donc développer des outils de travail qui rendent compte de cette réalité probabiliste. La valeur moyenne et l'écart quadratique sont des grandeurs héritées directement des probabilités ([3]).

Dans le cas d'un **spectre** de \hat{A} **discret**, la valeur moyenne des occurrences λ_n est la somme des résultats λ_n pondérés par leur probabilité d'apparition :

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n \lambda_n \mathcal{P}(\lambda_n)$$

En remplaçant la probabilité par son expression (cfr l'équation (2.13) pour le cas d'un spectre dégénéré), on trouve :

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_n \lambda_n \sum_{k=1}^{g_n} |\langle \phi_n^k | \Psi \rangle|^2 \\ &= \sum_n \lambda_n \sum_{k=1}^{g_n} \langle \Psi | \phi_n^k \rangle \langle \phi_n^k | \Psi \rangle \\ &= \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} \langle \Psi | \lambda_n | \phi_n^k \rangle \langle \phi_n^k | \Psi \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} \langle \Psi | \hat{A} | \phi_n^k \rangle \langle \phi_n^k | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \hat{A} \left(\sum_n \sum_{k=1}^{g_n} | \phi_n^k \rangle \langle \phi_n^k | \right) | \Psi \rangle \\ &\stackrel{(2.5)}{=} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \end{aligned}$$

où la dernière égalité s'obtient grâce à la relation de fermeture pour un spectre discret dégénéré. Pour un **spectre continu**, on peut effectuer le même raisonnement :

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \int \lambda d\mathcal{P}(\lambda) \\ &= \int \lambda \langle \Psi | \phi_\lambda \rangle \langle \phi_\lambda | \Psi \rangle d\lambda \\ &= \int \langle \Psi | \hat{A} | \phi_\lambda \rangle \langle \phi_\lambda | \Psi \rangle d\lambda \\ &= \langle \Psi | \hat{A} \left(\int | \phi_\lambda \rangle \langle \phi_\lambda | d\lambda \right) | \Psi \rangle \\ &\stackrel{(2.9)}{=} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \end{aligned}$$

en utilisant la relation de fermeture pour un spectre continu.

Définition 4 La **valeur moyenne** d'une observable \hat{A} dans l'état Ψ est la moyenne des résultats obtenus en effectuant un grand nombre de mesures. Lorsque Ψ est donné, les probabilités d'apparition des différents résultats sont connues, et la valeur moyenne théorique s'écrit :

$$\langle \hat{A} \rangle_\Psi = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$

Plus précisément, dans le cas d'un spectre discret non dégénéré, la relation devient :

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n \lambda_n |\langle \phi_n | \Psi \rangle|^2$$

Pour un spectre discret dégénéré, on obtient :

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n \lambda_n \sum_{k=1}^{g_n} |\langle \phi_n^k | \Psi \rangle|^2$$

Et pour un spectre continu non dégénéré, on trouve :

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \lambda |\langle \phi_\lambda | \Psi \rangle|^2 d\lambda$$

La valeur moyenne donne l'ordre de grandeur des résultats obtenus lors de la mesure de l'état $|\Psi\rangle$ par l'opérateur \hat{A} . Pour rendre compte de la dispersion des résultats autour de cette valeur moyenne, on utilise l'écart quadratique.

Définition 5 *L'écart quadratique moyen $\Delta\hat{A}$ d'une observable pour l'état Ψ se définit par*

$$\Delta\hat{A}^2 = \langle\hat{A}^2\rangle_\Psi - \langle\hat{A}\rangle_\Psi^2 = \langle(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2\rangle_\Psi$$

En utilisant la définition de la moyenne, cette relation devient :

$$\Delta\hat{A}^2 = \langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle - (\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle)^2 = \langle\Psi|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2|\Psi\rangle$$

Plus précisément, dans le cas d'un spectre discret non dégénéré, l'écart quadratique se définit par :

$$\Delta\hat{A}^2 = \sum_n \lambda_n^2 |\langle\phi_n|\Psi\rangle|^2 - \left(\sum_n \lambda_n |\langle\phi_n|\Psi\rangle|^2 \right)^2$$

Pour un spectre discret dégénéré, on obtient :

$$\Delta\hat{A}^2 = \sum_n \lambda_n^2 \sum_{k=1}^{g_n} |\langle\phi_n^k|\Psi\rangle|^2 - \left(\sum_n \lambda_n \sum_{k=1}^{g_n} |\langle\phi_n^k|\Psi\rangle|^2 \right)^2$$

Et pour un spectre continu non dégénéré, on trouve :

$$\Delta\hat{A}^2 = \int \lambda^2 |\langle\phi_\lambda|\Psi\rangle|^2 d\lambda - \left(\int \lambda |\langle\phi_\lambda|\Psi\rangle|^2 d\lambda \right)^2$$

2.4 Espace de Hilbert équipé

Jusqu'ici, nous nous sommes placés dans un espace de Hilbert équipé en supposant que les opérateurs et les différentes opérations y étaient bien définis. Ceci n'est vrai que lorsque les opérateurs ont un spectre discret ([6, 7]). Le théorème spectral nous dit en effet que les opérateurs à spectre discret sont bornés, et ceux à spectre continu ne le sont pas.

Théorème 1 *Tout opérateur hermitien compact² (donc borné) sur un espace de Hilbert possède un système orthogonal complet de vecteurs propres.*

$$\hat{A} = \sum_n \lambda_n \sum_{k=1}^{g_n} |\phi_n^k\rangle\langle\phi_n^k|$$

Tout opérateur hermitien non borné s'écrit selon son spectre $\sigma(\hat{A})$ comme :

$$\hat{A} = \int_{\sigma(\hat{A})=\mathbb{R}} \lambda |\phi_\lambda\rangle\langle\phi_\lambda| d\lambda$$

Mais nous pouvons également nous en convaincre par nous même. Rappelons-nous que

$$\Psi \in \mathbb{H} = L^2 \quad \text{si} \quad \|\Psi\|^2 = \langle\Psi|\Psi\rangle < \infty.$$

Pour que $\hat{A}\Psi$ soit bien défini, il faudra donc que $\|\hat{A}\Psi\|^2 < \infty$. Ce sera le cas pour les spectres discrets, mais pas pour les spectres continus.

2. Un opérateur \hat{Z} sur \mathbb{H} est compact si pour toute suite bornée $(x_n) \subset \mathbb{H}$, la suite $(\hat{Z}x_n)$ contient une sous-suite convergente. Un opérateur compact est borné.

Par exemple, pour un opérateur à **spectre discret** dégénéré, la norme sera bornée :

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A}\Psi | \hat{A}\Psi \rangle &= \left\langle \sum_n \lambda_n \sum_{k=1}^{g_n} a_n^k \phi_n^k \middle| \sum_m \lambda_m \sum_{l=1}^{g_m} a_m^l \phi_m^l \right\rangle \\
&= \sum_{n,m} \lambda_n \lambda_m \sum_{k=1}^{g_n} \sum_{l=1}^{g_m} \overline{a_n^k} a_m^l \langle \phi_n^k | \phi_m^l \rangle \\
&= \sum_n \lambda_n^2 \sum_{k=1}^{g_n} |a_n^k|^2 \\
&\leq \lambda_{max}^2 \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} |a_n^k|^2 \\
&\leq \lambda_{max}^2 \langle \Psi | \Psi \rangle \\
&< \infty
\end{aligned}$$

On dira que $\hat{A}\mathbb{H} \subset \mathbb{H}$. Dans le cas d'un opérateur à spectre discret, $\hat{A}\Psi$ appartiendra donc à \mathbb{H} et les opérations telles que $\hat{A}|\Psi\rangle$, $\hat{A}^2|\Psi\rangle$, $\langle \Psi | \hat{A}^2 | \Psi \rangle$ ou $(\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle)^2$ seront bien définies.

Dans le cas d'un opérateur possédant un **spectre continu**, $\hat{A}\Psi$ ne sera plus forcément de carré sommable. Par exemple, soit $\Psi(x)$ qui modélise l'état d'une particule à une dimension ($x \in \mathbb{R}$). Et soit l'opérateur \hat{x} qui mesure la position de cette particule : $\hat{x}\Psi(x) = x\Psi(x)$.

L'espace de Hilbert pour ce système à une particule (dans la représentation de Schrödinger) s'écrit :

$$\mathbb{H} = L^2 = \left\{ \Psi(x) : \langle \Psi(x) | \Psi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx < \infty \right\}$$

Et $\hat{x}\Psi(x)$ restera dans \mathbb{H} seulement si $\Psi(x) \in \mathbb{H}$ répond à la condition suivante :

$$\langle x\Psi(x) | x\Psi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\Psi(x)|^2 dx < \infty$$

c'est-à-dire si $x\Psi(x) \in \mathbb{H}$. Il faut donc restreindre \mathbb{H} pour bien définir $\hat{x}\Psi(x)$. De même, si l'on souhaite appliquer plusieurs fois l'opérateur, il faudra encore restreindre l'espace de départ.

Et pour pouvoir appliquer deux opérateurs l'un à la suite de l'autre, $\hat{B}\hat{A}\Psi(x)$, il faut s'assurer que le tout reste bien de carré sommable. De même, pour définir correctement les quantités $d\mathcal{P}(\lambda)$, $\langle \hat{A} \rangle$, $\Delta \hat{A}$, il est nécessaire de réduire le domaine de \hat{A} et \hat{B} à un sous-espace \mathcal{E} qui reste invariant sous les actions des deux opérateurs.

$$\mathcal{E} = \bigcap_{n,m=0}^{\infty} D(Z^n W^m)$$

pour $Z, W = \hat{A}$ ou \hat{B} . L'ensemble D représente le domaine nécessaire pour que l'opérateur $Z^n W^m$ soit bien défini.

Typiquement, on utilisera les opérateurs (non bornés) de position ($\hat{q} = \hat{r}$), de moment ($\hat{p} = -i\hbar\nabla$) et hamiltonien (\hat{H}) en définissant

$$\mathcal{E} = \bigcap_{n,m=0}^{\infty} D(Z^n W^m)$$

pour $Z, W = \hat{q}, \hat{p}$ ou \hat{H} . Cet espace restera invariant sous ces opérateurs :

$$Z\mathcal{E} \subset \mathcal{E} \text{ pour } Z, W = \hat{q}, \hat{p} \text{ ou } \hat{H}$$

Les espaces de bras et des kets devront également être élargis à \mathcal{E}' et \mathcal{E}^\times . L'espace de Hilbert équipé s'écrira alors :

$$\begin{aligned}
\mathcal{E} &\subset \mathcal{D} \subset \mathbb{H} \subset \mathcal{D}^\times \subset \mathcal{E}^\times \\
\mathcal{E} &\subset \mathcal{D} \subset \mathbb{H} \subset \mathcal{D}' \subset \mathcal{E}'
\end{aligned}$$

Chapitre 3

Le problème de la mesure

3.1 Retour aux sources

Revenons à présent à l'expérience des deux fentes ([1]). Nous avons réfuté l'affirmation \mathcal{X} suivant laquelle *un électron passe soit par la fente 1, soit par la fente 2*. Pourtant, si les électrons sont des particules, ils doivent bien avoir une trajectoire déterminée. La solution pour déterminer par quelle fente passe l'électron, c'est sans doute simplement de l'observer.

Exécutons à nouveau l'expérience : un canon projette des électrons un par un en direction d'une plaque percée de deux fentes. Ces électrons sont enregistrés via un détecteur mobile. Nous avons alors constaté que, si les électrons se comportent comme des corpuscules, leur probabilité de présence réagit comme une fonction d'onde.

Ajoutons derrière les deux fentes une source de lumière, comme illustré sur la figure 3.1.(a). Comme les charges électriques diffusent la lumière, nous pouvons alors observer concrètement par quel fente l'électron est passé : lorsque l'on repère un éclair lumineux proche de la fente 1, on sait qu'un électron vient de passer par cet orifice.

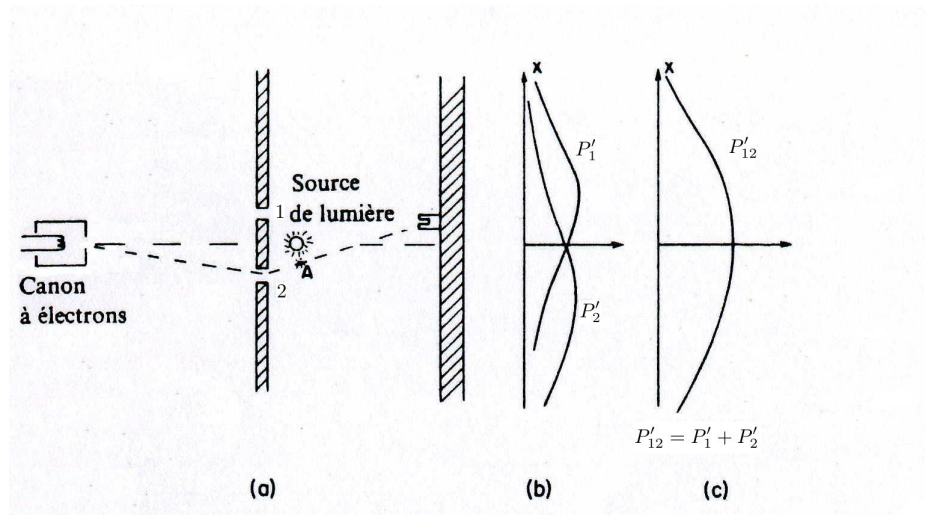


FIGURE 3.1 – Expérience des deux fentes avec des électrons - [1]

Lors du déroulement de l'expérience, chaque électron est classé suivant qu'il est passé par la fente 1 ou la fente 2. *Il n'y a pas d'électron passant par les deux fentes*. Au total, on peut construire les probabilités individuelles P'_1 et P'_2 selon le trajet de l'électron.

Pour connaître la probabilité totale, il faut juste reprendre l'ensemble des électrons, c'est à dire la somme

de ceux qui sont passés par la fente 1 et de ceux qui ont traversé la fente 2. La probabilité totale est donc la somme des probabilités individuelles :

$$P'_{12} = P'_1 + P'_2$$

Or cette probabilité est différente de celle obtenue auparavant (voir figures 1.3 et 3.1) : $P'_{12} \neq P_{12}$. Nous sommes passés d'une courbe d'interférence à une courbe sans interférence. La seule différence entre ces dispositifs étant la source de lumière, nous devons conclure que *l'observation a modifié le résultat de l'expérience*.

Ce n'est pas tout. Nous avons prouvé précédemment que l'affirmation \mathcal{X} était incorrecte. Or dans cette dernière expérience, il n'y avait pas d'électrons passant par les deux fentes ; ils passaient soit par la fente 1, soit par la fente 2 ! Comment cette affirmation peut-elle être fausse et vraie à la fois ?

A nouveau, c'est la mesure qui est la cause de cette apparente incohérence. Il faut considérer que le système « sans mesure intermédiaire » et celui « avec mesure intermédiaire » sont deux expériences distinctes.

Dans le système « sans mesure intermédiaire », on ne cherche pas à déterminer le chemin des électrons. Ils se répartissent alors selon une probabilité P_{12} ; et cette probabilité permet de réfuter l'affirmation \mathcal{X} . Autrement dit, quand on ne cherche pas à savoir par où passe l'électron, sa fonction d'onde est telle que la proposition \mathcal{X} est incorrecte.

Dans le système « avec mesure intermédiaire » par contre, c'est comme si on forçait les électrons à décider par quelle fente ils passent. Une fois que leur trajectoire est connue, leur probabilité de présence devient la même que pour les balles macroscopiques : P'_{12} . Autrement dit, quand on mesure par quelle fente l'électron passe, sa fonction d'onde est modifiée de telle manière qu'on puisse conclure que la proposition \mathcal{X} est correcte.

L'affirmation \mathcal{X} est donc *indécidable* puisqu'elle est confirmée lorsqu'on veut la confirmer et réfutée si l'on souhaite la réfuter !

Nous touchons ici à un des problèmes fondamentaux de la mécanique quantique. Contrairement à ce qu'il se passait dans les expériences macroscopiques, la mesure a une grande influence à l'échelle microscopique.

3.2 Cohérence et décohérence

On souhaite mesurer la grandeur physique A (la position par exemple) de l'état $|\Psi\rangle$. Les postulats 4, 5 et 6 vus précédemment donnent les probabilités d'obtenir les différents résultats possibles. Supposons qu'on mesure, à l'instant t_0 , la valeur λ , valeur propre de l'opérateur \hat{A} . Juste avant la mesure, il y avait une certaine probabilité d'obtenir cette valeur. Mais immédiatement après la mesure, on sait que λ a été mesurée, on ne peut donc plus parler de probabilité. L'état doit prendre en compte ce changement et donc être *modifié par la mesure*. A nouveau, la forme du spectre de \hat{A} aura une influence sur la décomposition de l'état ([3]).

Postulat 6 (Décohérence quantique pour un opérateur à spectre discret) Soit un système dans l'état $|\Psi\rangle$. Supposons que la mesure de la grandeur physique A , associé à l'opérateur \hat{A} de **spectre discret**, rende un résultat λ_n . L'état du système, immédiatement après cette mesure, est projeté sur le sous-espace propre associé à λ_n . Le résultat est normalisé car c'est un état physique.

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\lambda_n} \frac{P_n|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|P_n|\Psi\rangle}} = \frac{P_n|\Psi\rangle}{\|P_n|\Psi\rangle\|}$$

Si λ_n n'est pas dégénérée, l'état après la mesure est son vecteur propre $|\phi_n\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle \xrightarrow{\lambda_n} |\phi_n\rangle$$

Et si λ_n est dégénérée, l'état devient :

$$|\Psi\rangle = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} a_n^k |\phi_n^k\rangle \xrightarrow{\lambda_n} \sum_{k=1}^{g_n} a_n^k |\phi_n^k\rangle \left(\sum_{k=1}^{g_n} |a_n^k|^2 \right)^{-\frac{1}{2}}$$

Dans ce cas, le résultat dépend de l'état $|\Psi\rangle$ de départ.

Postulat 7 (Décohérence quantique pour un opérateur à spectre continu)

Par contre, si le **spectre** est **continu**, il est plus délicat d'écrire l'état résultant. En effet, il est impossible de mesurer exactement une valeur propre λ' . Puisque les appareils ont une précision limitée, la mesure ne peut jamais porter que sur un intervalle $[\lambda' - \Delta, \lambda' + \Delta]$. Le projecteur P_n doit alors être remplacé par

$$P_\Delta(\lambda') = \int_{\lambda' - \Delta}^{\lambda' + \Delta} |\phi_\lambda\rangle \langle \phi_\lambda| d\lambda$$

Comme précédemment, l'état deviendra :

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\lambda'} \frac{P_\Delta(\lambda')|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | P_\Delta(\lambda') | \Psi \rangle}} = \frac{P_\Delta(\lambda')|\Psi\rangle}{\|P_\Delta(\lambda')|\Psi\rangle\|}$$

$$\int a_\lambda |\phi_\lambda\rangle d\lambda \xrightarrow{\lambda'} \int_{\lambda' - \Delta}^{\lambda' + \Delta} a_\lambda |\phi_\lambda\rangle d\lambda \left(\int_{\lambda' - \Delta}^{\lambda' + \Delta} |a_\lambda|^2 d\lambda \right)^{-\frac{1}{2}}$$

Plaçons-nous dans le cas d'un spectre discret non dégénéré pour évaluer les conséquences de ce postulat.

Avant la mesure, l'état du système évolue d'une certaine manière. La figure 3.2 représente cette évolution de l'état $|\Psi\rangle(0)$ à l'état $|\Psi\rangle(t_0)$, juste avant la mesure. Nous verrons plus loin comment calculer cette évolution mais nous connaissons d'ores et déjà les probabilités de mesurer telle ou telle valeur propre.

Par contre, une fois la mesure accomplie, il n'est plus question de probabilité. L'état se retrouve dans un sous-espace propre bien défini (celui de la valeur propre mesurée λ_n). A partir de ce nouvel état, on sait à nouveau comment évoluera le système et les différentes probabilités qui lui seront associées. Autrement dit, l'évolution des systèmes nous est connu sauf quand on y effectue une mesure ; car alors l'état change brutalement sans qu'il y ait vraiment d'explication.

Si l'on veut effectuer une deuxième mesure, juste après la première, il ne subsiste plus aucune incertitude sur le résultat : la mesure donnera la valeur propre λ_n avec une probabilité de 1 puisque l'on se trouve déjà dans son espace propre. Les probabilités ne sont donc pas conservées par le processus de mesure.

Ce changement brusque de l'état et des probabilités est appelé **décohérence quantique**.

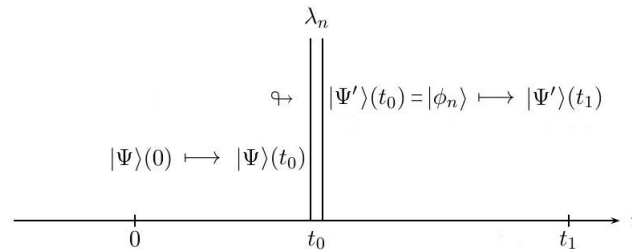


FIGURE 3.2 – Décohérence quantique lors d'une mesure en t_0 - [3]

La physique classique considère que les opérations de mesure n'ont pas d'impact sur les systèmes. Les mesures peuvent être permutées : mesurer A puis B revient au même que mesurer B puis A . Il est donc

possible de mesurer simultanément plusieurs grandeurs.

En mécanique quantique, par contre, la mesure modifie complètement l'état quantique. Il n'est souvent pas possible de permuter deux opérateurs de mesure :

$$\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle \neq \hat{B}\hat{A}|\Psi\rangle$$

En effet, supposons que ces opérateurs aient un spectre discret non dégénéré. Pour simplifier, on suppose dans cette expérience que leur mesure donne toujours le même résultat : λ_n , de vecteur propre $|\phi_{\lambda_n}\rangle$, pour \hat{A} et b_m , de vecteur propre $|\phi_{b_m}\rangle$, pour \hat{B} . Les projections successives sont :

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{B}} |\phi_{b_m}\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |\phi_{\lambda_n}\rangle$$

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |\phi_{\lambda_n}\rangle \xrightarrow{\hat{B}} |\phi_{b_m}\rangle$$

On constate bien que les états finaux sont différents :

$$\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle = |\phi_{\lambda_n}\rangle \neq \hat{B}\hat{A}|\Psi\rangle = |\phi_{b_m}\rangle$$

Pour que la mesure d'un opérateur ne modifie pas la mesure de l'autre, il faut qu'ils aient leurs vecteurs propres en commun ($\{|\Phi_{\lambda_n, b_m, k}\rangle\}$ pour un spectre discret dégénéré) de telle manière que

$$\hat{A}|\Phi_{\lambda_n, b_m, k}\rangle = \lambda_n |\Phi_{\lambda_n, b_m, k}\rangle$$

$$\hat{B}|\Phi_{\lambda_n, b_m, k}\rangle = b_m |\Phi_{\lambda_n, b_m, k}\rangle$$

Les mesures successives donneront alors le même état :

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{B}} |\Phi_{\lambda_n, b_m, k}\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |\Phi_{\lambda_n, b_m, k}\rangle$$

$$|\Psi\rangle \xrightarrow{\hat{A}} |\Phi_{\lambda_n, b_m, k}\rangle \xrightarrow{\hat{B}} |\Phi_{\lambda_n, b_m, k}\rangle$$

On dira que ces opérateurs sont *compatibles*.

Définition 6 On définit le **commutateur** de deux opérateur comme :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Deux opérateurs \hat{A} et \hat{B} sont dits **compatibles** si leur commutateur est nul. Dans ce cas, mesurer l'un ne modifiera pas le résultat rendu par l'autre. Il est possible d'effectuer les mesures successivement et même simultanément.

Si le commutateur n'est pas nul, on dit que les opérateurs sont **incompatibles**. Mesurer une des grandeurs modifiera alors le résultat rendu par l'autre. Il n'est pas possible de mesurer simultanément deux opérateurs incompatibles.

Comme on connaît maintenant l'impact qu'une mesure peut avoir sur une mesure ultérieure, il est devenu possible de **préparer un état** (c'est-à-dire **lever la dégénérescence**). Nous souhaitons déterminer l'état juste après la mesure à partir, et uniquement à partir, du résultat de la mesure ([3]).

Par exemple, supposons que l'on applique l'opérateur \hat{A} de spectre discret sur l'état $|\Psi\rangle$ avec λ_n comme résultat.

- Si λ_n n'est pas dégénérée, l'état juste après la mesure sera son vecteur propre $|\phi_{\lambda_n}\rangle$. Ce nouvel état est *indépendant de l'état de départ* $|\Psi\rangle$, autrement dit, il est entièrement déterminé par la valeur propre λ_n obtenue lors de la mesure.

- Par contre, si la valeur propre λ_n est dégénérée, elle possède plusieurs vecteurs propres $|\phi_{\lambda_n, k}\rangle$. Et l'état après la mesure dépend encore de $|\Psi\rangle$:

$$\sum_{k=1}^{g_n} a_n^k |\phi_n^k\rangle \left(\sum_{k=1}^{g_n} |a_n^k|^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \quad \text{pour} \quad a_n^k = \langle \phi_{\lambda_n, k} | \Psi \rangle$$

La solution pour n'obtenir qu'un seul vecteur propre associé à λ_n , c'est de combiner deux mesures.

- Supposons qu'il existe un opérateur \hat{B} compatible avec \hat{A} de telle manière que le résultat (λ_n, b_m) des deux mesures combinées n'ait qu'un seul vecteur propre noté $|\phi_{\lambda_n, b_m}\rangle$. Comme nous l'avons vu, l'état après les deux mesures sera le vecteur propre $|\phi_{\lambda_n, b_m}\rangle$. A nouveau, l'état obtenu ne dépendra que du résultat (λ_n, b_m) des mesures combinées.
- Il n'est pas toujours possible de trouver un tel opérateur \hat{B} . Supposons que le résultat de la mesure combinée (λ_n, b_m) soit dégénéré. Il y aura donc plusieurs vecteurs propres $|\phi_{\lambda_n, b_m, k}\rangle$ associés à cette valeur propre. Et l'état juste après les mesures sera une combinaison linéaire de ces vecteurs propres dont les coefficients dépendent de $|\Psi\rangle$. La solution est d'appliquer une troisième mesure \hat{C} , compatible aux deux autres, de telle manière que le résultat (λ_n, b_m, c_l) des mesures combinées n'ait qu'un seul vecteur propre noté $|\phi_{\lambda_n, b_m, c_l}\rangle$.

On peut continuer ce raisonnement jusqu'à construire des ensembles de mesures compatibles qui permettent de déterminer complètement un état selon les résultats obtenus.

Penchons nous maintenant sur l'évolution temporelle d'un système quantique.

Postulat 8 (Évolution temporelle des systèmes quantiques) *L'évolution de l'état $|\Psi\rangle$ est donnée par l'équation de Schrödinger*

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle(t)}{dt} = \hat{H} |\Psi\rangle(t) \quad (3.1)$$

où \hat{H} est un opérateur modélisant l'hamiltonien du système dont les valeurs propres représentent les niveaux d'énergie de l'état $|\Psi\rangle(t)$.

Il y a en fait deux manières possibles de considérer l'évolution dans le temps d'un système :

- Dans la représentation de Schrödinger ($\mathbb{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$), qui a été utilisée jusqu'à présent, l'état $|\Psi\rangle(t)$ dépend du temps et les opérateurs de mesure \hat{A} sont, quant à eux, indépendants du temps. Cela semble plus intuitif : un système qui évolue dans le temps et des opérations de mesure toujours identiques.
- Mais il existe une autre manière de considérer l'évolution des systèmes. Dans la représentation d'Heisenberg ($\mathbb{H} = l^2(\infty)$), les états $|\Psi\rangle_*$ sont indépendant du temps et ce sont les opérations de mesures $\hat{A}_*(t)$ qui varient. Ce qui signifie qu'un système n'évolue pas ! Par contre, la mesure d'une même grandeur A (la position par exemple) effectuée en t_0 ou en t_1 induira des opérateurs différents ($\hat{A}_*(t_0) \neq \hat{A}_*(t_1)$) et donc ne donnera pas les mêmes résultats.

Ces deux représentations sont équivalentes et on peut facilement passer de l'une à l'autre. Reprenons l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle(t)}{dt} = \hat{H} |\Psi\rangle(t)$$

Il est possible de lui trouver un équivalent décrivant l'évolution de l'opérateur $\hat{A}_*(t)$ dans la représentation d'Heisenberg. Puisque l'équation de Schrödinger décrit l'évolution de $|\Psi\rangle(t)$, on peut réécrire l'équation exclusivement comme une évolution temporelle de l'état :

$$|\Psi\rangle(t) = F(t, t_0) |\Psi\rangle(t_0)$$

où $F(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t - t_0)\right)$ est un **opérateur d'évolution** sur \mathbb{H} qui est

- borné,
- unitaire ($FF^\dagger = F^\dagger F = \mathbb{I}$),
- additif ($F(t_1, t_0) + F(t_2, t_0) = F(t_1 + t_2, t_0)$),
- continu ($F(t_2, t_1)F(t_1, t_0) = F(t_2, t_0)$),
- tel que $F(t_0, t_0) = \mathbb{I}$.

Le lien entre les deux représentations se fait via l'opérateur d'évolution :

$$\hat{A}_*(t) = F^{-1}(t, 0) \hat{A} F(t, 0) \quad F(t, 0) |\Psi\rangle_* = |\Psi\rangle(t)$$

La **loi d'évolution des observables** est alors l'équivalent de l'équation de Schrödinger dans la représentation d'Heisenberg :

$$i\hbar \frac{\partial \hat{A}_*(t)}{\partial t} = [\hat{A}_*(t), \hat{H}_*(t)]$$

où

$$\hat{H}_*(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

La proposition suivante permet de montrer que les valeurs attendues restent les mêmes quelque soit la représentation :

Proposition 2 $\langle \hat{A}_*(t) \rangle = \langle \hat{A} \rangle(t)$

En effet, ces deux représentations sont complètement équivalentes par leur validité mathématique. Celle de Schrödinger étant plus intuitive, nous continuerons à l'utiliser.

Finalement, l'opérateur F est unitaire et possède donc la propriété de conserver le produit scalaire et la norme :

$$\langle F\Psi | F\Phi \rangle = \langle F^\dagger F\Psi | \Phi \rangle = \langle \Psi | \Phi \rangle \quad \forall \Psi, \Phi \in \mathbb{H}$$

Ainsi, l'évolution temporelle d'un système conserve la norme unité de son état. La mesure par contre, ne conserve pas la norme puisqu'il faut normaliser l'état par après.

3.3 Principe d'incertitude d'Heisenberg

Revenons une dernière fois à l'expérience des deux fentes ([1]). Précédemment, nous avons vu qu'ajouter une source de lumière modifiait profondément le système jusqu'à détruire la figure d'interférence (cfr. section 3.1, page 23). Il faut donc conclure que la lumière affecte les électrons : les photons rentrent en collision avec eux et modifient leur trajectoire. Pour observer le trajet de l'électron sans modifier sa distribution de probabilité, il faudrait donc réduire l'impact des photons. Le but est de déterminer la trajectoire de l'électron sans que cela ne perturbe sa fonction de répartition.

Diminuons l'intensité lumineuse, c'est-à-dire le nombre de photons envoyés. On observe que les éclairs lumineux, produits lorsqu'un électron diffuse un photon, gardent la même intensité. Les photons diffusés se répartissent selon la probabilité P'_{12} . Mais lorsque l'intensité lumineuse est trop faible, certains électrons ne sont pas heurtés par des photons, c'est à dire qu'ils ne sont pas détectés. On ne peut donc plus déterminer par quelle fente ils sont passés ! Et ces électrons non détectés ont une probabilité de présence P_{12} caractérisée par les interférences. Autrement dit, diminuer l'intensité lumineuse ne permet pas de déterminer avec certitude le trajet des électrons.

Une autre solution serait d'augmenter la longueur d'onde de la lumière car cela diminue la quantité de mouvement propre à chaque photon. L'électron devrait en être moins affecté. Le problème survient pour des longueurs d'onde plus grandes que la distance séparant les fentes. A ce stade, le flash lumineux s'agrandit de telle manière qu'il est impossible de dire par où l'électron est passé. En effet, la longueur d'onde détermine la distance minimale entre deux points pour qu'ils soient perçus comme séparés. Si la longueur d'onde utilisée est plus grande que l'espace entre les fentes, il ne sera plus possible de discerner la fente 1 de la fente 2. A nouveau, c'est lorsqu'on ne peut plus déterminer le chemin de l'électron que la

figure d'interférence apparaît.

Autrement dit, quand on essaie de mesurer le système en réduisant les perturbations que la mesure y apporte, les résultats perdent en qualité. *Il n'est pas possible de réaliser une expérience qui dit par quel fente passe l'électron sans que cela ne perturbe sa fonction d'onde.* Notre fameuse proposition indécidable \mathcal{X} restera donc **toujours indécidable**, quel que soit le système construit.

Il semble ainsi y avoir une limite fondamentale qui restreint la précision des observations. Heisenberg a formalisé cette observation sous forme d'un principe d'incertitude ([4]).

Postulat 9 (Principe d'incertitude) *Pour deux opérateurs de mesure, \hat{A} et \hat{B} , la relation suivante limite la précision que l'on peut obtenir dans les résultats des mesures :*

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2} \left| \frac{1}{i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$$

où $\Delta\hat{A}$ et $\Delta\hat{B}$ sont les écarts quadratiques moyens.

3.4 Limites de la théorie

Les postulats énoncés dans ce travail forment la base de la mécanique quantique. Le reste est sujet à interprétations. En effet, la théorie quantique soulève beaucoup de questions sans réponses. Récapitulons les zones d'ombre :

1. Tout d'abord, nous avons vu que les conséquences de la mesure différaient profondément lorsqu'on se trouve dans un système macroscopique ou dans un système microscopique. Il semble que l'acte de la mesure n'affecte pas les objets macroscopiques. Pourquoi y a-t-il cette distinction de taille ? En réalité, il est possible de construire un système constitué de particules microscopiques, mais de taille macroscopique, qui obéit aux lois de la mécanique quantique¹. La taille n'est donc pas un critère de différenciation entre les domaines classique et quantique. Mais alors, qu'est-ce qui distingue le domaine d'application de la physique classique de celui de la mécanique quantique ?
2. Revenons à la théorie quantique en elle-même. Par définition, la mesure ne permet pas d'obtenir toute l'information disponible à propos de l'état du système (cfr postulat 2) : seules certaines valeurs peuvent être mesurées. De plus, nous ne pouvons pas prédire quelle valeur sera effectivement mesurée (cfr postulats 3, 4, 5) : seules les probabilités nous sont connues. Ceci paraît incohérent avec le fait que toute l'information du système est contenue dans l'état (cfr postulat 1) et que l'évolution de cet état avant la mesure est complètement déterminé (cfr postulat 8). Si toute l'information est accessible, pourquoi ne pourrait-on pas la mesurer ?
3. Ce n'est pas tout. Mesurer un état le projette irrémédiablement dans un autre état (cfr postulats 6 et 7), de sorte que certaines assertions en deviennent complètement indécidables (cfr postulat 9). L'évolution de l'état - qui est unitaire et qui conserve les probabilités et la superposition des vecteurs propres - est en contradiction totale avec la décohérence survenant lors de la mesure : perte de l'unitarité, de la superposition et des probabilités. Mais pourquoi y a-t-il une telle décohérence ? Et par quel phénomène un état peut-il se retrouver dans un autre état ? Est-ce un phénomène instantané ou y a-t-il moyen de mesurer un « état intermédiaire » ?
4. Nous soulèverons encore un problème qui semble a priori trivial. Quand faut-il appliquer le postulat 8 (évolution temporelle) et quand faut-il utiliser les postulats 6 et 7 (décohérence) ? Il est essentiel de pouvoir répondre à cette question. Pourtant, la théorie ne dit rien à ce sujet : il n'existe aucun critère mathématique qui différencie ces deux situations. L'expérimentateur serait donc seul juge ? Pour répondre à cette question, il est nécessaire de savoir précisément ce qu'est la mesure. Auletta

1. Expérience de A. Aspect.

([5] p 215) définit la **mesure** comme « une insertion temporaire dans le système observé \mathcal{S} d'un certain couplage énergétique avec un autre système - l'appareil \mathcal{A} - tel qu'il est possible d'inférer des propriétés de \mathcal{S} en observant les propriétés de \mathcal{A} ». Mais cette définition est suffisamment vague pour varier au gré des interprétations.

La théorie quantique n'est constituée que des postulats énoncés ci-dessus. A l'heure actuelle, il n'est donc pas possible d'apporter une solution univoque à ces différents problèmes. Il existe déjà plusieurs courants de pensée qui s'y attellent, chacun avec sa stratégie.

- Par exemple, l'**interprétation de Copenhague** rejette ces questions pour ne se concentrer que sur la prédiction des résultats. Cette interprétation pourrait se résumer par la maxime « *Shut up and calculate*² » car, selon elle, les postulats ne doivent être utilisés que comme des **outils de calculs**, ni plus, ni moins. Il est alors inutile de se demander ce qu'il advient dans les zones d'ombre car la théorie ne prétend pas y répondre. Tant que les prédictions sont correctes, on considère que les postulats sont valides. Bien que frustrante, cette interprétation a le mérite de rester prudente.
- La **théorie de la décohérence** s'attaque au problème n°1. Une manière d'y répondre, c'est de considérer que la plupart des objets macroscopiques sont « mesurés » continuellement. Au cœur de la matière, les particules constituant un objet sont en contact, et ce contact ferait office de « mesure sans observateur ». Les objets macroscopiques seraient donc en continuelle décohérence de manière telle qu'ils suivent les lois de la physique classique. Le problème de la taille serait alors un problème de corrélations entre particules.
- On peut également citer la **théorie des mondes multiples** qui traite partiellement les points 2 et 3. L'idée c'est que, lors d'une mesure, les différents résultats possibles sont tous mesurés, mais dans des mondes différents. Malheureusement, cette théorie n'est absolument pas vérifiable.

Il existe encore bien d'autres interprétations mais, à ce jour, aucune d'elles ne permet de répondre de manière exhaustive aux questions soulevées. Pourtant, ces discussions ne sonnent pas le glas de la mécanique quantique car, s'il reste à débattre les questions de forme, les prédictions sont d'ores et déjà correctes.

Dans la deuxième partie de ce mémoire, nous nous attaquerons également au problème n°1, à savoir le lien entre la mécanique quantique et notre monde macroscopique. Nous suivrons l'hypothèse de Penrose selon laquelle la masse est au cœur du problème.

2. [D. Mermin]

Deuxième partie

Les équations de
Schrödinger-Newton

Chapitre 4

Une alternative à l'équation de Schrödinger

Dans la première partie de ce mémoire, nous avons passé en revue les principes fondamentaux de la mécanique quantique. Nous avons compris que la théorie quantique ne repose que sur des postulats mathématiques et abstraits, qui semblent fort éloignés de la réalité physique.

Cette théorie nous échappe d'autant plus que les phénomènes décrits à l'échelle microscopique ne sont pas les mêmes que ceux qui nous affectent tous les jours, à notre échelle macroscopique. Cette dichotomie est mise en évidence par une expérience de pensée dite du *chat de Schrödinger*. Par cet exemple, nous verrons à quel point il est absurde de vouloir appliquer la théorie quantique aux objets macroscopiques. C'est à partir de cette même expérience du chat que nous présenterons l'idée du physicien et mathématicien Penrose. Il a prouvé que la formulation de l'équation de Schrödinger porte en elle la séparation des domaines quantique et macroscopique. Penrose proposa alors une amélioration de l'équation de Schrödinger en lui associant une relation de Poisson, de manière à ajouter des auto-interactions aux systèmes.

Mais avant toute chose, nous allons étudier d'un peu plus près l'équation de Schrödinger et ses diverses formulations.

4.1 L'équation de Schrödinger sous la loupe

Dans cette deuxième partie, nous allons abandonner la notation de Dirac tout en restant dans le formalisme de Schrödinger. En effet, cette notation bra-ket ne serait pas utile dans la suite et alourdirait les équations.

Nous nous plaçons cette fois dans une représentation « position » pour pouvoir utiliser les variables usuelles de position dans l'espace \mathbb{R}^3 avec $\{e_x, e_y, e_z\}$ comme base de référence.

Pour une seule particule

Dans un premier temps, nous n'allons considérer qu'une seule particule, repérée par le vecteur $r = xe_x + ye_y + ze_z$. Nous considérons donc un opérateur \hat{r} à spectre continu dont les valeurs propres sont associées à des vecteurs propres $|\phi_r\rangle$ indépendants du temps. Les valeurs propres de \hat{r} correspondent bien sûr à la mesure de la position de la particule, c'est à dire à r :

$$\begin{aligned}\hat{r} |\phi_r\rangle &= r |\phi_r\rangle \\ \langle \phi_r | \hat{r} &= r \langle \phi_r | \end{aligned} \tag{4.1}$$

Réécrivons à présent l'équation (3.1) de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle(t)}{dt} = \hat{H} |\Psi\rangle(t) \triangleq \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}(\hat{r}, t) \right) |\Psi\rangle(t)$$

L'état dépendant de la position s'écrit $\Psi(r, t) = \langle \phi_r | \Psi \rangle \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Et sa norme n'est pas affectée par ce changement :

$$\begin{aligned}
\|\Psi\|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(r, t)|^2 dr \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} |\langle \phi_r | \Psi \rangle|^2 dr \\
&= \int_{\mathbb{R}^3} \langle \Psi | \phi_r \rangle \langle \phi_r | \Psi \rangle dr \\
&= \langle \Psi | \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\phi_r\rangle \langle \phi_r| dr \right) | \Psi \rangle \\
&= \langle \Psi | \mathbb{I} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle
\end{aligned}$$

Les normes seront donc calculées dans la suite grâce à la norme L^2 : $\|\Psi(r, t)\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(r, t)|^2 dr$.

Nous allons maintenant ré-exprimer l'équation de Schrödinger selon $\Psi(r, t)$ en appliquant le bra $\langle \phi_r |$ des deux cotés :

$$\langle \phi_r | i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle(t) = \langle \phi_r | \hat{H} | \Psi \rangle(t) = H\Psi(r, t)$$

On sait que les $|\phi_r\rangle$ sont indépendants du temps ; le bra $\langle \phi_r |$ peut donc rentrer dans la dérivée temporelle. Ensuite $\langle \phi_r | \hat{U}(\hat{r}) | \Psi \rangle(t)$ sera remplacé par $U(r)\Psi(r, t)$ grâce à (4.1). L'**équation de Schrödinger** pour un système composé d'une particule (ou d'un ensemble de particules considéré comme un tout) de masse m soumise à une énergie potentielle $U(r)$ s'écrit alors

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = H\Psi(r, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r, t) + U(r)\Psi(r, t) \quad (4.2)$$

où $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Lorsque la particule n'est mesurée que selon une seule direction x , cette relation se simplifie en

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = H\Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x, t)$$

On peut rendre l'équation (4.2) indépendante du temps en posant

$$\Psi(r, t) = \Psi(r) \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right)$$

Ceci nous donne l'**équation de Schrödinger indépendante du temps** :

$$E\Psi(r) = H\Psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r) + U(r)\Psi(r) \quad (4.3)$$

La constante E a de plus une importance particulière. On constate que c'est la valeur propre de l'opérateur hamiltonien H , ayant l'état Ψ comme vecteur propre. Souvenons-nous de ce que cela signifie : la mesure de l'opérateur hamiltonien nous montre le système dans l'état Ψ avec la valeur E comme résultat de la mesure. Autrement dit, la constante E nous donne l'énergie du système dans l'état Ψ .

Pour plusieurs particules

Les choses se compliquent lorsqu'on considère plusieurs particules. Dans ce cas, il nous faudra projeter le ket état $|\Psi\rangle$ sur une combinaison des positions possibles des différents particules.

Pour faire simple, considérons l'espace de Hilbert associé à n particules ([13]). Il est essentiel que les particules considérées soient de types différents, sinon les particules ne sont plus discernables. Par exemple,

l'atome de tritium, composé d'un électron, d'un proton et de deux neutrons, ne peut pas être étudié ici, à moins de considérer le noyau (le proton et les deux neutrons) comme une seule particule.

Considérons donc nos n particules dans un espace à 3 dimensions et notons $r_k = x_k e_x + y_k e_y + z_k e_z$ le vecteur position de la k -ième particule, dans le système de coordonnées de référence $\{e_x, e_y, e_z\}$.

Avant d'aller plus loin, il est nécessaire de se demander ce qu'est la mesure de position sur un tel système. Peut-on encore écrire $\hat{r}|\phi_r\rangle = r|\phi_r\rangle$? Mesurer la position des n particules revient à mesurer que

- la première particule est dans une certaine position r_1
- **et** que la deuxième particule est dans une certaine position r_2
- **et**, etc.

Le système doit être vu comme un tout et la mesure comme une photographie instantanée de toutes les positions de toutes les particules. La relation (4.1) doit alors se réécrire

$$(\widehat{r_1, \dots, r_n}) |\phi_{(r_1, \dots, r_n)}\rangle = (r_1, \dots, r_n) |\phi_{(r_1, \dots, r_n)}\rangle$$

où

- la valeur propre (r_1, \dots, r_n) signifie « la particule 1 est dans la position r_1 , **et** la particule 2 dans la position r_2 **et** ... **et** la particule n dans la position r_n . »
- l'opérateur $(\widehat{r_1, \dots, r_n})$ est la mesure de position pour chaque particule 1, 2, ..., n
- le vecteur ket $|\phi_{(r_1, \dots, r_n)}\rangle$ est juste le vecteur propre associé à la valeur propre (r_1, \dots, r_n) .

L'état de ce système de n particules se note $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n, t) \in L^2(\mathbb{R}^{3n})$ et s'obtient en projetant $|\Psi\rangle(t)$ sur $\langle\phi_{(r_1, \dots, r_n)}|$. La fonction $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_n, t)$ nous donnera la probabilité que les n particules au temps t se trouvent respectivement dans les positions r_1, r_2, \dots, r_n . La probabilité totale, c'est-à-dire la norme, s'exprime donc

$$\|\Psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^{3n}} |\Psi(r_1, \dots, r_n, t)|^2 dr_1 \dots dr_n$$

Pour n particules, l'équation de Schrödinger se réécrit :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r_1, \dots, r_n, t) = \left(- \sum_{k=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_k} \nabla_k^2 + U(r_1, \dots, r_n) \right) \Psi(r_1, \dots, r_n, t) \quad (4.4)$$

où $\nabla_k^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2}$.

Une histoire de numéros

Nous avons dit plus haut que nous pouvons écrire l'état $\Psi(r_1, \dots, r_n, t)$ que si les particules sont discernables. Ce fait mérite quelques explications ([12]).

Pour décrire l'évolution d'une seule particule, une fonction $\Psi(r)$ sur l'espace suffit. Il suffit de considérer la probabilité que la particule se trouve en différents endroits A, B, C.

Considérons maintenant deux particules *discernables*, c'est à dire qu'on peut les reconnaître l'une de l'autre et donc les numéroter. On pourrait penser qu'il suffit de rassembler les fonctions d'état individuelles de chaque particule : $(\Psi_1(r_1), \Psi_2(r_2)) = \Psi$. Pour décrire l'évolution du système totale, il faudrait alors considérer séparément les probabilités $|\Psi_1|^2$ et $|\Psi_2|^2$. Mais cela ne reflète pas la réalité.

En effet, supposons que la première particule soit en A et la deuxième en B. Cette situation sera associée à une certaine amplitude de probabilité. Et chaque situation sera associée une nouvelle probabilité. On doit donc concevoir l'état sur un double espace : $\Psi = \Psi(r_1, r_2)$, comme nous l'avons fait précédemment.

Prenons un exemple pour clarifier les choses. Ne considérons tout d'abord que le cas à une particule, ne possédant que 10 positions permises. Les vecteurs propres sont notés (dans la notation bra-ket) :

$$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots, |9\rangle.$$

Puisque ces vecteurs propres correspondent à l'effondrement de l'état après la mesure considérée, l'état de la particule s'écrit alors comme une superposition linéaire des vecteurs propres ¹ :

$$|\Psi\rangle = z_0|0\rangle + z_1|1\rangle + \dots + z_9|9\rangle$$

Pour deux particules, les vecteurs propres doivent être des « paires » ² :

$$|0\rangle|0\rangle, |1\rangle|0\rangle, \dots, |9\rangle|9\rangle$$

où $|1\rangle|0\rangle$ doit signifier que la première particule est dans l'état $|1\rangle$ et la deuxième dans l'état $|0\rangle$. Il y a donc maintenant 100 résultats possibles au lieu des 10 précédents. L'état pour deux particules s'écrit :

$$|\Psi\rangle = z_{00}|0\rangle|0\rangle + z_{10}|1\rangle|0\rangle + \dots + z_{99}|9\rangle|9\rangle$$

On comprend alors pourquoi la fonction d'onde des deux particules ne peut pas se décomposer en une simple somme de deux fonctions d'onde.

Ces développements ne sont possibles que pour des particules distinguables - un proton et un électron par exemple. Mais si l'on prend 2 protons, il n'est plus possible de les numéroter. En effet, observons notre système à un moment donné et fixons que le proton à droite est "1", et celui à gauche "2". Laissons un peu de temps s'écouler et observons à nouveau le système : nous voyons deux protons et nous sommes incapables de dire lequel est "1" et lequel est "2". Nous sommes bel et bien en présence de particules indiscernables. Ces particules doivent se traiter différemment.

Les particules peuvent se diviser en deux groupes selon leurs caractéristiques de permutation : les fermions, comprenant les électrons, les neutrons ou les protons, et les bosons, dont les photons font partie. Dans un groupe de fermions identiques, permuter deux particules aura pour effet de changer le signe de l'état total : $|\Psi\rangle \mapsto -|\Psi\rangle$. Alors que dans un groupe de bosons, ce type de permutation laisse l'état invariant.

Reprenons notre exemple à 10 vecteurs propres sur deux fermions identiques, deux électrons par exemple. Tout d'abord, les deux fermions ne peuvent pas être dans le même état simultanément ³. Si c'était le cas, il serait possible d'interchanger les particules sans que cela affecte l'état total, ce qui contredit la définition même des fermions. Les vecteurs propres $|0\rangle|0\rangle, |1\rangle|1\rangle, \dots, |9\rangle|9\rangle$ sont donc exclus. Qu'en est-il pour les états de la forme $|0\rangle|1\rangle$? Si on échange les deux particules, un tel état deviendrait $|1\rangle|0\rangle$. Nous devons donc considérer des vecteurs propres de la forme $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle - |1\rangle|0\rangle)$ de manière à ce que l'échange des particules change le signe de l'état. Ceci nous donne 45 vecteurs propres au lieu des 100 précédents.

Pour deux bosons identiques, il faudra considérer les vecteurs propres de la forme $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle)$, et les doublons $|0\rangle|0\rangle$ seront acceptés. Il y aura donc 55 vecteurs propres.

Ces considérations sont importantes mais elles ajoutent de la complexité dans notre étude. Dans ce travail, nous n'en tiendrons pas compte et nous n'étudierons que le cas de deux particules discernables.

4.2 Le chat de Schrödinger à la sauce Penrose

Nous allons à présent voir que l'équation de Schrödinger, qui régit l'évolution temporelle de l'état, porte en elle ses propres limites.

Nous recherchons la limite entre le domaine de la physique classique, et celui de la mécanique quantique. Des expériences ont été réalisées pour chercher cette limite. Par exemple, il est possible de garder des particules quantiques éloignées de plusieurs mètres en état de cohérence ⁴. Ce n'est donc pas la taille du

1. NB : Dans la représentation position, l'état peut s'écrire $\Psi(r, t) = z_0\delta_{r-0} + \dots + z_9\delta_{r-9}$ où les distributions de Dirac sont les vecteurs propres.

2. L'expression $|x\rangle|y\rangle$ est le produit tensoriel des deux états dont le résultat est un état dans l'espace composé du produit tensoriel des espaces de départ.

3. Principe d'exclusion de Pauli.

4. Expérience de A. Aspect.

système qui doit induire la décohérence. Serait-ce la masse ? Un objet macroscopique peut-il être soumis aux lois de la mécanique quantique ? Pour répondre à cette question, nous allons tout d'abord suivre la réflexion proposée par Schrödinger.

Imaginons un dispositif, représenté à la figure 4.1, constitué d'une source d'électrons, d'un écran séparateur et d'une boîte. La source envoie un électron vers l'écran séparateur. Arrivé à cet écran, l'électron a 50% de chance de continuer tout droit et 50% de chance de ricocher vers le haut. Dans le cas où l'électron traverse l'écran, on suppose alors qu'il entre dans une boîte fermée et provoque la mort du chat se trouvant à l'intérieur. Autrement dit, lorsque la source libère un électron, il y a 50% de chance de retrouver le chat vivant et 50% de chance de le retrouver mort.

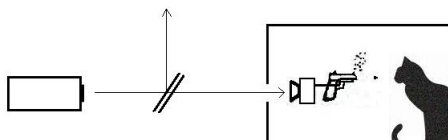


FIGURE 4.1 – Représentation de l'expérience du chat de Schrödinger.

Si l'on applique les postulats de la mécanique quantique à ce système macroscopique, on écrira que le chat vivant est dans l'état χ et que le chat mort est dans l'état η . Après l'envoi d'un électron, ces deux états se superposent et le chat se trouve dans un état superposé $\psi = \chi + \eta$, ce qui signifie que le chat est à la fois mort et vivant. Cet état superposé perdure jusqu'à ce qu'on ouvre la boîte. A ce moment, l'état s'effondre en l'un ou l'autre des états propres.

Bien entendu, Schrödinger utilisait cette expérience « du chat » pour démontrer l'absurdité de ce raisonnement. En effet, le chat *ne peut pas* être à la fois mort et vivant. Pourrions-nous dire que le chat est mort et vivant tant que personne ne l'observe ? Pourrions-nous supposer que nous sommes à la fois en train de lire ce mémoire et de cuire des crêpes sous prétexte que personne ne nous voit ? Il paraît clair que la superposition quantique du chat s'est irrémédiablement effondrée. On peut également dire que les objets macroscopiques sont en constante décohérence. La mécanique quantique n'est donc pas applicable aux objets de grande taille. Il nous reste maintenant à comprendre pourquoi.

Pour ce faire, nous allons suivre le raisonnement de Penrose ([8],[12]). Reprenons l'expérience du chat avec une petite modification. Au lieu de tuer le chat, l'électron qui continue horizontalement va déplacer de la matière (voir figure 4.2).

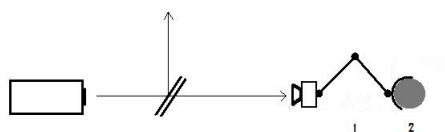


FIGURE 4.2 – L'expérience du chat de Schrödinger à la sauce Penrose.

L'avantage de ce changement, c'est que nous obtenons maintenant une expérience valable sur n'importe quelle masse. Par exemple, si la matière déplacée se réduit à un seul électron, le système devient alors entièrement quantique car tout est à l'échelle microscopique. En augmentant petit à petit la masse déplacée, on arrivera inévitablement à un cas macroscopique similaire à celui du chat. Cette expérience fait donc le lien entre les domaines quantique et classique. Nous voulons bien sûr trouver des lois qui fassent également le lien entre les mécaniques quantiques et classiques. Pour le moment, cela n'est pas possible à cause de la linéarité de l'équation de Schrödinger comme nous allons le voir ci-dessous.

Revenons à cette nouvelle expérience. Supposons que la masse est à l'origine dans une certaine position 1. Si un électron passe l'écran séparateur en direction de la masse, il déplace celle-ci dans la position 2. Quand la masse est dans la position 1, on associe au système un état $\chi(r, t)$. De la même manière, quand la masse est dans la position 2, on note l'état $\eta(r, t)$. Ces deux états sont stationnaires car ils n'évolueront pas d'eux-mêmes. Ils résolvent alors l'équation de Schrödinger. Supposons que leurs énergies associées soient la même, leurs équations de Schrödinger s'écrivent :

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = E\chi$$

$$i\hbar \frac{\partial \eta}{\partial t} = E\eta$$

Cela signifie que la superposition $\psi = \chi + \eta$ sera également un état stationnaire car l'équation de Schrödinger est linéaire.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = E\psi$$

Traduisons ce fait à l'aide de l'expérience du chat, qui est l'expression d'un système de taille macroscopique. La mécanique quantique prédit que l'état superposé « *le chat est à la fois mort et vivant* » est un état stable qui n'évoluera pas sans intervention extérieure. Or on souhaiterait que cet état ne soit pas stable mais au contraire qu'il évolue naturellement vers l'un des états de base $|\chi\rangle$ ou $|\eta\rangle$.

Pour ce faire, Penrose propose de passer à la théorie relativiste d'Einstein où le temps est lié à géométrie de l'espace-temps et donc à la gravité. Il est alors nécessaire de réinterpréter l'opérateur $\frac{\partial}{\partial t}$ du point de vue de la relativité. L'espace-temps peut être vu comme une collection d'espaces stationnaires, un feuillet pour chaque temps t (voir figure 4.3).

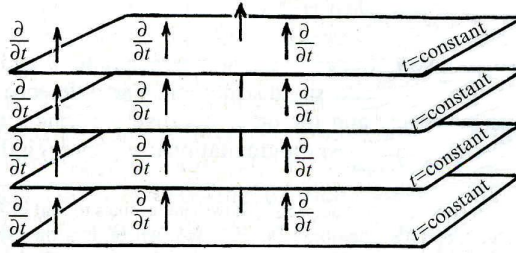


FIGURE 4.3 – L'espace-temps vu comme une collection d'espaces stationnaires - [8]

Sur chacun de ces espaces stationnaires, l'opérateur $\frac{\partial}{\partial t}$, qui dicte l'évolution temporelle de chaque point, est un vecteur κ le long duquel les variables spatiales (x, y, z) sont constantes. Dans la relativité générale, l'équation de Schrödinger se réécrit donc

$$i\hbar \kappa \bullet = E \bullet$$

et cette nouvelle expression, reste linéaire.

Jusqu'ici, nous avons considéré le cas où tous les espaces stationnaires étaient reliés par le même vecteur $\kappa = \frac{\partial}{\partial t}$. Mais dans notre expérience, l'évolution temporelle ne peut pas être la même pour l'état χ , relié à une masse dans la position 1, et pour l'état η , relié à la masse déplacée dans la position 2. En effet, il y a un déplacement de matière, ce qui modifie la gravité, donc l'espace temps. Cette modification doit donc se retrouver dans le vecteur d'évolution temporelle κ .

Ainsi, pour nos deux états de base χ et η , nous aurons deux vecteurs différents

$$i\hbar \kappa_\chi \chi = E\chi$$

$$i\hbar \kappa_\eta \eta = E\eta$$

Un problème se pose à présent : comment calculer la superposition ψ ? Malheureusement, on se rend vite compte qu'il est nécessaire de garder une opération $\frac{\partial}{\partial t}$ universelle. La solution est alors de conserver telle

quelle l'équation de Schrödinger mais en tenant compte du champs gravitationnel généré par la matière. Le potentiel doit donc prendre en compte les effets du champs. Dans ce cas, Penrose postule que les superpositions se décomposeront en un temps proportionnel à \hbar/E_G où E_G est l'auto-énergie gravitationnelle de la différence entre les deux distributions de masse pour χ et η . Bien entendu, puisque la superposition va se décomposer en ses états de base, il serait intéressant de prévoir dans quel état elle va effectivement se retrouver.

Le système d'**équations de Schrödinger-Newton** est une proposition pour cette décohérence gravitationnelle. Une particule libre obéit normalement à l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Penrose propose d'y ajouter un potentiel gravitationnel de self-interaction. Une particule libre de masse m obéira alors à une équation de Schrödinger pour la particule se déplaçant dans un champ gravitationnel généré par une équation de Poisson :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \\ \nabla^2 U = 4\pi G m^2 |\Psi|^2 \end{array} \right. \quad (4.5)$$

où $G = 6,67428 \cdot 10^{-11} [\mathbf{m}^3\mathbf{kg}^{-1}\mathbf{s}^{-2}]$ est la constante de gravitation⁵ ([14]). L'énergie potentielle U que nous ajoutons représente l'action de la particule sur elle-même, qui, dans ce cas-ci, n'est donc plus jamais libre.

Ces équations d'évolution temporelle sont à présent non linéaires : ce qui signifie que les superpositions quantiques ne sont plus permises. Or nous savons que les superpositions jouent un rôle important pour les particules quantiques. Après tout, l'équation de Schrödinger est efficace à l'échelle quantique. Nous nous attendons donc à trouver des auto-interactions très faibles pour les particules quantiques, de manière à autoriser leurs superpositions quantiques. Les équations de Schrödinger-Newton à l'échelle quantique ne seraient alors qu'une approximation de l'équation de Schrödinger.

Pour les masses importantes par contre, nous souhaitons trouver des états collapsés, et des superpositions impossibles. Il nous faudra bien sûr vérifier que c'est bien le cas ; qu'une masse importante entraîne une réduction de l'état. Nous devons bien sûr vérifier si deux états stationnaires mènent encore à une superposition stationnaire. Il faudra aussi pouvoir distinguer les états de base des superpositions. Nous allons donc étudier dans la suite le comportement des solutions des équations de Schrödinger-Newton.

5. Les unités sont notées entre crochets pour éviter de confondre la masse m avec les mètres $[\mathbf{m}]$.

Chapitre 5

Etude pour une particule

Dans ce chapitre, nous allons nous pencher sur l'étude des solutions des équations de Schrödinger-Newton. Plusieurs auteurs s'y sont déjà attelés ([9, 10, 11]) et, dans un premier temps, nous confirmerons une partie de leurs résultats. Pour ce faire, nous nous sommes imposés quelques restrictions :

- Nous n'étudierons dans ce mémoire que les équations stationnaires. Nous trouverons alors les différentes solutions stationnaires $\Psi(r)$ ainsi que leurs énergies. Harrison ([10]) a prouvé que la solution associée à l'énergie la plus faible, l'état fondamental, était la seule solution stable. Toutes les autres sont instables et doivent, avec le temps, se décomposer en l'état fondamental. Harrison l'a également vérifié via une étude de stabilité des solutions.
- Nous nous restreindrons principalement à la symétrie sphérique. A nouveau, seul Harrison s'est attaqué à des problèmes plus complexes, en considérant les équations en symétrie axiale ou encore en deux dimensions. Nous nous essaierons à l'étude des solutions dans le cas le plus général, sans l'approximation de la symétrie sphérique. Mais nous verrons que ce cas s'avère d'une difficulté paralysante.
- Enfin, nous considérons que nos masses sont ponctuelles. Cette approximation sera correcte pour les particules atomiques, mais peut être sujette à controverse si l'on considère des particules de la masse d'une planète.

Bien que ces nombreuses hypothèses facilitent le travail, il reste plusieurs étapes avant de pouvoir intégrer numériquement nos équations. Nous devons tout d'abord passer dans un système sans unité. Ensuite, nous considérerons les équations stationnaires et en symétrie sphérique. Et enfin, nous pourrons intégrer nos équations, sans oublier de fixer nos conditions de bord. Une fois que nous aurons trouvé nos solutions stationnaires, nous pourrons nous demander quelle est l'influence de la masse sur ces solutions.

5.1 Expression des équations

Pour des raisons d'interprétation, nous allons ré-exprimer les équations de Schrödinger-Newton à la manière d'Harrison ([10]). L'énergie potentielle U sera ainsi remplacée par son potentiel Φ : $U = m\Phi$. Ce changement n'a pas de grande influence pour le moment mais il jouera un rôle important quand nous voudrions exprimer les équations de Schrödinger-Newton pour deux particules.

Nous réécrivons ci-dessous les équations (4.5) où, par souci de concision, l'expression stationnaire a été mise entre accolades :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r^*}^2 \Psi^* + m\Phi^* \Psi^* = i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t^*} \{ = E^* \Psi^* \} \\ \nabla_{r^*}^2 \Phi^* = 4\pi Gm |\Psi^*|^2 \end{array} \right. \quad (5.1)$$

Les étoiles servent à rappeler que toutes ces grandeurs portent des unités. Ainsi, le potentiel Φ^* s'exprime dans les unités $[\mathbf{m}^2 s^{-2} = \text{Joule } kg^{-1}]$ et l'état Ψ^* dans les unités $[\mathbf{m}^{-3/2}]$.

Enlever les unités

Nous voulons à présent passer dans un système d'équations sans unité pour obtenir le système suivant :

$$\begin{cases} -\nabla_r^2 \Psi + \Phi \Psi = i \frac{\partial \Psi}{\partial t} \{= E \Psi\} \\ \nabla_r^2 \Phi = |\Psi|^2 \end{cases} \quad (5.2)$$

Pour ce faire, il suffit d'appliquer un redimensionnement à chacune de nos variables :

$$\begin{cases} r = \delta r^* & \text{avec } \delta = \frac{8\pi G m^3}{\hbar^2} & \text{dont les unités sont } \left[\frac{1}{\mathbf{m}} \right] \\ \Psi = \alpha \Psi^* & \alpha = \sqrt{\frac{1}{\delta^3}} & \left[\sqrt{\mathbf{m}^3} \right] \\ \Phi = \beta \Phi^* & \beta = \frac{1}{4\pi G m \delta} = \frac{\hbar^2}{32\pi^2 G^2 m^4} & \left[\frac{s^2}{\mathbf{m}^2} \right] \\ E = \epsilon E^* & \epsilon = \frac{\beta}{m} = \frac{\hbar^2}{32\pi^2 G^2 m^5} & \left[\frac{s^2}{kg \mathbf{m}^2} \right] \\ t = \gamma t^* & \gamma = \frac{1}{\hbar \epsilon} = \frac{32\pi^2 G^2 m^5}{\hbar^3} & \left[\frac{1}{s} \right] \end{cases} \quad (5.3)$$

Les coefficients ont également été choisis de manière à conserver la valeur de la norme :

$$\|\Psi\|^2 = \int |\Psi|^2 dr = \frac{\alpha^2}{\delta^3} \int |\Psi^*|^2 dr^* = \|\Psi^*\|^2$$

Ainsi, il ne faudra pas nous préoccuper de la valeur de la norme lorsque nous repasserons dans les variables dimensionnées, après avoir trouvé nos solutions.

En étudiant le système (5.2), on se rend compte qu'il présente une invariance d'échelle. En effet, il est possible d'appliquer le même coefficient $\sigma \in \mathbb{R}$ aux variables et de retrouver les équations (5.2). Il suffit d'effectuer la changement suivant pour s'en rendre compte.

$$\begin{aligned} (\Psi, \Phi, E) &\rightarrow \sigma^2 (\Psi, \Phi, E) \\ r &\rightarrow \sigma^{-1} r \\ t &\rightarrow \sigma^{-2} t \end{aligned} \quad (5.4)$$

Cette invariance d'échelle va revêtir une importance capitale pour normaliser les états. De fait, l'effet de σ sur la norme est :

$$\|\Psi\|^2 \rightarrow \sigma \|\Psi\|^2$$

Il nous est donc possible de normaliser nos solutions une fois que nous les aurons obtenues. Ainsi, nous n'aurons pas besoin d'imposer une norme unité à nos solutions lors de l'intégration numérique, nous devons juste vérifier que leurs normes soient finies.

Equations stationnaires et symétrie sphérique

Comme mentionné précédemment, nous nous restreignons à l'étude des équations de Schrödinger-Newton stationnaires en symétrie sphérique.

[HYPOTHÈSE] Nous allons également supposer que Ψ est réel.

Reprenons les équations (5.2) dans le cas stationnaire et ajoutons-leur les notations suivantes :

$$\begin{cases} S = \Psi \\ V = E - \Phi \end{cases} \quad (5.5)$$

Les équations de Schrödinger-Newton se réécrivent alors simplement :

$$\begin{cases} \nabla^2 S = -SV \\ \nabla^2 V = -S^2 \end{cases} \quad (5.6)$$

Passons à présent en symétrie sphérique. Nous savons que nos coordonnées tridimensionnelles $r = (x, y, z)^\top$ peuvent s'exprimer en coordonnées sphériques :

$$\begin{cases} x &= \rho \sin \theta \cos \varphi \\ y &= \rho \sin \theta \sin \varphi \\ z &= \rho \cos \theta \end{cases}$$

En symétrie sphérique, les angles ne nous intéressent pas ; seule la distance ρ à l'origine aura de l'importance. Nos variables $V(r), S(r)$ deviennent alors exclusivement fonctions de cette distance ρ . Ainsi, le calcul de la norme se simplifie en :

$$\| S(\rho) \|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} (S(\rho))^2 dx dy dz = \int_{\mathbb{R}} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \rho^2 (S(\rho))^2 \sin \theta d\theta d\varphi d\rho = 4\pi \int \rho^2 (S(\rho))^2 d\rho$$

De même, le laplacien en symétrie sphérique se réécrit :

$$\nabla^2 \bullet = \frac{\partial^2 \bullet}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bullet}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bullet}{\partial z^2} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} (\rho \bullet) = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial \bullet}{\partial \rho} \right)$$

Finalement, notons $()'$ la dérivation par rapport à ρ et réexprimons une dernière fois les équations de Schrödinger-Newton :

$$\boxed{\begin{cases} (\rho S)'' = -\rho S V \\ (\rho V)'' = -\rho S^2 \end{cases}} \quad (5.7)$$

ou encore

$$\begin{cases} (\rho^2 S')' = -\rho^2 S V \\ (\rho^2 V')' = -\rho^2 S^2 \end{cases} \quad (5.8)$$

En pratique, nous allons résoudre numériquement les équations (5.7) au moyen d'intégrateurs numériques. Une fois que nous aurons trouvé des solutions de norme finie, nous pourrons appliquer les étapes suivantes de manière à retrouver les fonctions Ψ et Φ dimensionnées :

1. Normaliser les solutions S et V grâce à une adaptation de l'invariance d'échelle (5.4). Dès que la norme $\| S \|^2$ est finie, il est possible de normaliser S en choisissant un coefficient σ adéquat :

$$\begin{aligned} (S, V, E) &\rightarrow \sigma^2 (S, V, E) \\ \rho &\rightarrow \sigma^{-1} \rho \end{aligned} \quad (5.9)$$

Il suffit de poser $\sigma = (\| S \|^2)^{-1}$ pour assurer la normalisation de S et donc incidemment de l'état Ψ^* final.

2. Revenir aux variables Ψ et Φ grâce à (5.5).
3. Rendre leurs dimensions aux variables Ψ^* et Φ^* grâce à (5.3).

Avant de passer à l'analyse numérique proprement dite, nous allons présenter quelques résultats analytiques des équations (5.7).

Résultats analytiques

Les solutions S et V que nous recherchons doivent être lisses et S doit s'annuler quand $\rho \rightarrow \infty$ pour assurer une norme finie. Pour le caractère lisse, nous imposerons que S' et V' s'annulent en $\rho = 0$. Ces conditions sont essentielles pour les calculs qui suivent.

Nous cherchons maintenant une expression intégrale du système (5.7). Il suffit d'intégrer les équations (5.7) et (5.8), puis de les combiner et nous obtenons :

$$\begin{cases} S(\rho) = S_0 - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) S(\tau) V(\tau) d\tau \\ V(\rho) = V_0 - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) S^2(\tau) d\tau \end{cases} \quad (5.10)$$

où $S_0 = S(0)$, $V_0 = V(0)$.

A partir de ces expressions intégrales, nous pouvons exprimer l'énergie E en fonction de V . En effet, le potentiel Φ s'annule en l'infini et l'énergie nous est donnée par $E = V(\infty)$. Or nous connaissons l'expression de $V(\rho)$. A partir de cette expression, la fonction V peut être développée en puissance de ρ^{-1} pour obtenir :

$$V(\rho) = A + \frac{B}{\rho} + o\left(\frac{1}{\rho}\right) \quad (5.11)$$

$$\text{où} \quad A = V_0 - \int_0^\infty \tau S^2(\tau) d\tau, \quad B = \int_0^\infty \tau^2 S^2(\tau) d\tau$$

Vérifions ce développement avant d'aller plus loin. Grâce à (5.10), on sait que V peut s'écrire

$$V(\rho) = A + \frac{1}{\rho} B + \int_\rho^\infty \tau S^2(\tau) d\tau - \int_\rho^\infty \frac{\tau^2}{\rho} S^2(\tau) d\tau \quad (5.12)$$

Or, à ce stade, la fonction S est une solution stationnaire choisie pour être de norme finie :

$$\int_0^\infty \tau^2 S^2(\tau) d\tau < \infty,$$

ce qui signifie que $\tau^2 S^2(\tau)$ sera au moins de l'ordre $1/\tau^2$. Dans ce cas, les intégrales supplémentaires dans l'expression (5.12) seront bien au moins de l'ordre $1/\rho^2$.

Ainsi, l'énergie peut se calculer à partir de V en utilisant $E = V(\infty) = A$; mais cette valeur ne sera pas normalisée. Nous pouvons normaliser A en utilisant σ :

$$E = \sigma^2 A = \frac{A}{(\|\Psi\|^2)^2}$$

Mais nous pouvons également choisir de normaliser S et V avant de calculer $E = A$. La valeur de A sera alors automatiquement normalisée. Ces deux méthodes nous donnent la valeur de l'énergie normalisée.

Essayons maintenant de déduire le comportement de S et V à partir des expressions (5.7) et (5.10). Selon (5.10), la fonction $V(\rho)$ sera décroissante puisque

$$V'(\rho) = -\frac{1}{\rho^2} \int_0^\rho \tau^2 S^2(\tau) d\tau < 0$$

A partir de (5.7), nous constatons que nous n'avons que deux paramètres à moduler : S_0 et V_0 . Or, nous pouvons déjà prendre $S_0 > 0$. En effet, la valeur nulle est à exclure car si $S_0 = 0$, alors le couple $S = 0$, $V = V_0$ est toujours solution. Cette solution triviale ne nous intéresse pas. De plus, on peut se restreindre à l'étude des S_0 positifs. De fait, si une fonction \tilde{S} est solution de (5.7), alors $-\tilde{S}$ le sera également. Il est donc redondant d'étudier les S_0 négatifs. Enfin, grâce à l'invariance d'échelle, 5.9, il est possible de fixer un des deux paramètres à une valeur unitaire.

Etudions à présent le comportement des solutions de (5.7) pour S_0 fixé à 1 :

- Soit une condition initiale V_0 positive. Nous savons que V sera toujours décroissante. Selon (5.7), tant que la valeur de $V(\rho)$ est positive, la fonction $\rho S(\rho)$ sera oscillante. Mais dès que $V(\rho)$ devient négatif, alors $\rho S(\rho)$ a un comportement exponentiel et a donc de fortes chances de diverger. Néanmoins, une convergence de $\rho S(\rho)$ vers 0 reste possible si $S(\rho)$ décroît suffisamment.
- Soit une condition initiale V_0 négative. Dans ce cas on aura

$$S(\rho) \longrightarrow +\infty \text{ et } V(\rho) \longrightarrow -\infty \text{ quand } \rho \rightarrow +\infty$$

La référence ([11]) prouve analytiquement qu'un état borné, normalisable et unique existe quand $S_0 = 1$ et $0 < V_0 < S_0 = 1$. Dans ce cas, la fonction S va décroître asymptotiquement vers l'axe des abscisses. Cette solution est appelée *état fondamental* (*ground state*).

Et quand V_0 est supérieur à S_0 , il existe d'autres états bornés, appelés *non fondamentaux*, qui traverseront plusieurs fois l'axe des abscisses. Ces états non fondamentaux ne sont pas forcément uniques mais il existe au moins un état avec n zéros, $\forall n \in \mathbb{N}$. Nous pourrions donc numéroter les solutions bornées par n ; où n représente le nombre de fois que S , c'est-à-dire Ψ , traverse l'axe des abscisses.

Puisqu'on rejette les paramètres V_0 négatifs, on fixera dans la suite $V_0 = 1$ et S_0 variable. Il nous reste maintenant à bien choisir ce S_0 de manière à trouver des solutions bornées.

5.2 Etude numérique

Après ces résultats théoriques, nous allons résoudre numériquement notre problème ([9]). Le système d'équations (5.7) s'intègre grâce à des intégrateurs numériques (ode45 en matlab) sur un certain intervalle de ρ et à partir de conditions initiales particulières ($V_0 = 1$ et S_0 à discuter). Les autres conditions initiales à fixer sont $S'(0)$ et $V'(0)$ que nous posons à zéro pour que S et V soient lisses en l'origine.

Nous voulons intégrer nos équations de $\rho = 0$ à un certain ρ_{\max} . Mais les intégrateurs numériques ne peuvent pas gérer les équations en $\rho = 0$ à cause des divisions par ρ . Il faut alors lancer l'intégration à partir de $\rho = \rho_{init}$ au lieu de $\rho = 0$. Les valeurs de S et V en ρ_{init} doivent être approximées. Cette approximation peut être obtenue par une expansion en série autour de $\rho = 0$ ¹ :

$$\begin{cases} S(\rho) &= S_0 - \frac{\rho^2}{6} S_0 V_0 + \frac{\rho^4}{120} S_0 (S_0^2 + V_0^2) + \dots \\ V(\rho) &= V_0 - \frac{\rho^2}{6} S_0^2 + \frac{\rho^4}{60} V_0 S_0^2 + \dots \end{cases} \quad (5.13)$$

Comme condition finale, nous imposerons bien entendu que $S \rightarrow 0$ quand $\rho \rightarrow \infty$. Ainsi la solution sera normalisable. Nous sommes à présent parés pour intégrer les équations. Encore faut-il choisir quelle modélisation de (5.7) utiliser. Par exemple, le système ci-dessous ([9]), nommé *deriv2*, sera le plus utilisé dans la suite :

$$A = [S, X, V, Y] \text{ où } X = (\rho S)', Y = (\rho V)'.$$

$$\begin{cases} A(1)' = \frac{A(2) - A(1)}{\rho} \\ A(2)' = -\rho A(1) A(3) \\ A(3)' = \frac{A(4) - A(3)}{\rho} \\ A(4)' = -\rho A(1)^2 \end{cases}$$

Un autre système peut découler de (5.7) ([10]), et nous l'appellerons *deriv3*.

$$B = [S, Z, V, W] \text{ où } Z = (S)', W = (V)'.$$

$$\begin{cases} B(1)' = B(2) \\ B(2)' = -\frac{2B(2)}{\rho} - B(1)B(3) \\ B(3)' = B(4) \\ B(4)' = -\frac{2B(4)}{\rho} - B(1)^2 \end{cases}$$

Nous travaillerons pour le moment sur la modélisation *deriv2*. Lançons tout d'abord l'intégration avec des conditions initiales S_0 différentes. Deux exemples sont représentés à la figure 5.1.

1. Les dérivées de S et V en $\rho = 0$ sont obtenues par des dérivations successives de (5.7). Par exemple, la dérivée première de (5.7), $((\rho S)'')' = -SV - \rho(S'V + SV')$, est aussi égale à l'expression $(\rho S)^{(3)} = \rho S^{(3)} + 3S''$. Évaluée en $\rho = 0$, cette égalité nous donne $S''(0) = -S_0 V_0 / 3$.

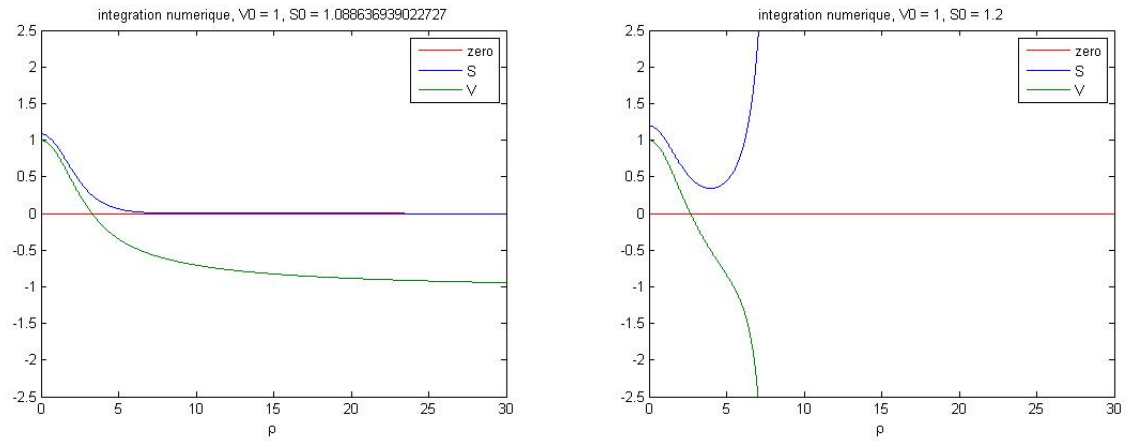


FIGURE 5.1 – Intégration numérique pour les équations (5.7) pour $V_0 = 1$ et avec différents S_0 . La figure de gauche, avec $S_0 = 1.088636939022727$, représente un état stationnaire appelé *état fondamental*. La figure de droite nous montre que S diverge vers $+\infty$ si S_0 est supérieure à cette valeur. Les autres solutions stationnaires se trouvent lorsqu'on diminue la valeur de S_0 . Il faut alors sélectionner les résultats dont la fonction S converge vers 0 à l'infini.

Au vu des ces résultats d'intégration, on comprend qu'il nous faudra chercher des conditions initiales S_0 adéquates pour obtenir des solutions S qui ne divergent pas à l'infini. Nous pouvons donc chercher les S_0 adéquats en modifiant nous-même la condition initiale S_0 selon que S diverge vers $+\infty$ ou vers $-\infty$. Cette *méthode intuitive* peut être implémentée en un algorithme qui donne les solutions suivantes :

n	S_0
0	1.088636939022727
1	0.826474523774667
2	0.744213788867689
3	0.700145360057018
4	0.671400593053027
5	0.650614610639635

Les fonctions S et V engendrées sont représentées dans les figures 5.2, 5.3 et 5.4. On peut voir que le numéro associé à la solution S_0 détermine le nombre de fois que la fonction S traverse l'axe des abscisses.

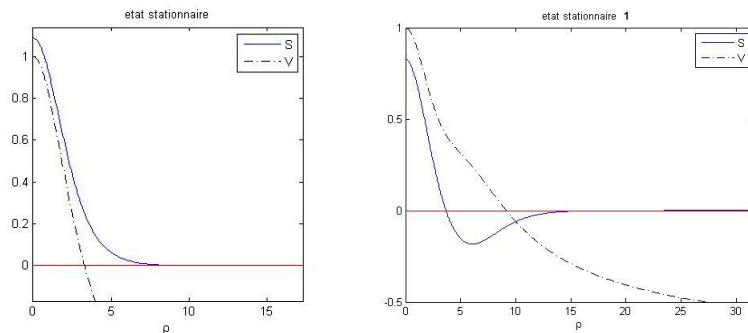


FIGURE 5.2 – Solutions (non normalisées) rendues par la *méthode intuitive*. La figure de gauche représente l'état fondamental alors que la figure de droite nous montre la solution stationnaire $n = 1$.

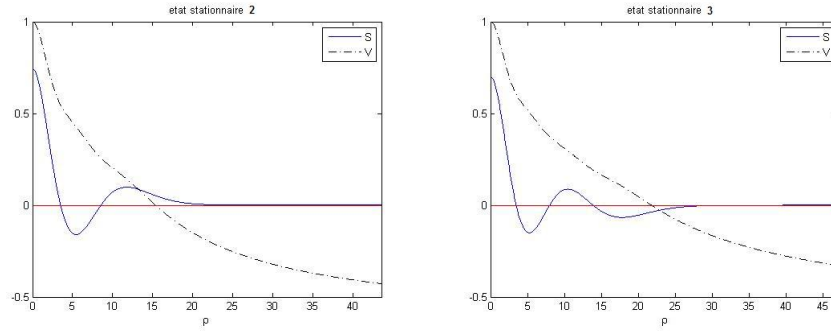


FIGURE 5.3 – Solutions stationnaires (non normalisées) rendues par la *méthode intuitive* : état $n = 2$ (à gauche) et $n = 3$ (à droite).

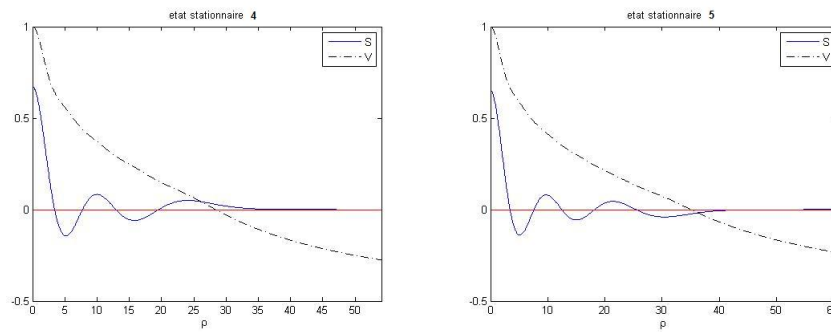


FIGURE 5.4 – Solutions stationnaires (non normalisées) rendues par la *méthode intuitive* : état $n = 4$ (à gauche) et $n = 5$ (à droite).

Une deuxième méthode, que l'on nomme *méthode de minimisation*², peut également être utilisée pour fournir les S_0 . Cela nous permet de vérifier les résultats rendus. Nous présentons brièvement cette méthode dans la suite.

Tout d'abord, il faut savoir que l'intégration est stoppée lorsque la fonction S est sur le point de diverger, c'est-à-dire lorsqu'elle dépasse en valeur absolue sa condition initiale S_0 . L'intégration s'arrête donc en un certain ρ_{stop} quand S a une certaine valeur $S_{stop} = \pm S_0$. Ce S_{stop} ne peut valoir que S_0 ou $-S_0$, suivant que la divergence est vers $+\infty$ ou $-\infty$.

Ainsi, à Chaque S_0 correspond un ρ_{stop} ; ceci nous donne une fonction $Rmax$ telle que $Rmax(S_0) = \rho_{stop}$. Cette fonction est représentée dans la figure 5.5 sur l'image en haut à gauche. On peut y voir que $Rmax$ présente un maximum. En ce point maximum, $Rmax$ est théoriquement infini, ce qui signifie que l'intégration va jusqu'au bout de l'intervalle d'intégration sans que S diverge. C'est donc en ce point que la solution cherchée se trouve.

On peut le voir également sur l'image en haut à droite qui représente la fonction $Smax$ associant S_{stop} à chaque S_0 . Lorsque l'intégration est arrêtée, $Smax$ est bloqué à la valeur S_0 ou $-S_0$. Dès que $Smax$ est entre ces deux extrêmes, cela signifie que l'intégration a été jusqu'au bout. Notre S solution doit valoir 0 lorsque ρ tend vers l'infini. Cette solution aura donc un $Smax$ nul. La solution se trouve donc bien lorsque $Smax$ traverse l'axe des abscisses.

Finalement, l'image en bas à gauche n'est qu'une adaptation de $Rmax$ de manière à trouver facilement son minimum via une optimisation numérique. Le S_0 trouvé par l'optimisation nous donne alors la solution recherchée, qui a été représentée sur l'image en bas à droite.

2. Dans les codes matlab, cette méthode est nommée AF.

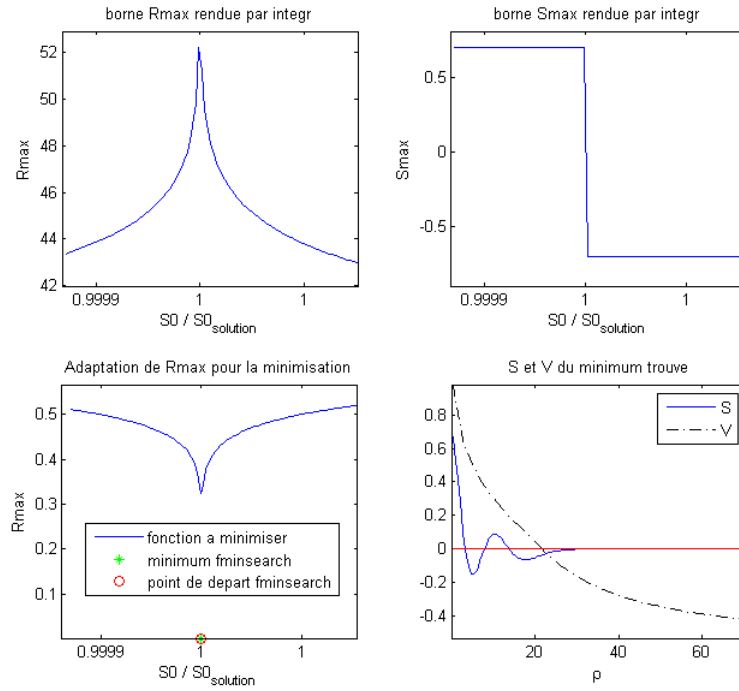


FIGURE 5.5 – Explication de la *méthode de minimisation*. L'image en haut à gauche représente la fonction $Rmax(S_0) = \rho_{stop}$; la solution se trouve en son maximum. L'image en haut à droite représente la fonction $Smax(S_0) = S_{stop}$; la solution se trouve quand $Smax$ traverse l'axe des abscisses. L'image en bas à gauche est une adaptation de $Rmax$ de manière à trouver facilement son minimum via une optimisation numérique. Le point de départ utilisé pour la recherche du minimum est le S_0 rendu par la méthode intuitive. On peut voir que ce S_0 est très proche du minimum exact de la fonction à minimiser. L'image en bas à droite nous donne finalement la solution recherchée.

Nous allons maintenant prouver que ces deux méthodes, *intuitive* et *de minimisation*, donnent les mêmes résultats. Pour commencer, comparons les points de départ S_0 (pour $V_0 = 1$) associés aux différentes solutions :

n	méthode intuitive	méthode de minimisation
0	1.088636938710230	1.088636938710231
1	0.826474523774667	0.826474523774667
2	0.744213788867689	0.744213788867689
3	0.700145360057018	0.700145360057018
4	0.671400593053027	0.671400593053027
5	0.650614610639635	0.650614610639636
6	0.634599531870136	0.634599531870137
7	0.621719214727512	0.621719214727512
8	0.611034493745437	0.611034493745437
9	0.601961711588648	0.601961711588649

La figure 5.6 nous montre l'erreur absolue entre ces S_0 , sur l'image de droite. Et l'image de gauche nous prouve que, puisque les S_0 sont proches, les solutions S seront également presque identiques.

Finalement, nous constatons que les deux méthodes sont équivalentes en ce qui concerne la précision. Par contre, la méthode *de minimisation* nécessite une approximation des minima avant de pouvoir minimiser correctement $Rmax$. De plus, elle n'est pas plus rapide, mais au contraire, semble plus lente que la méthode *intuitive*. De ce fait, nous privilégierons la méthode *intuitive* dans la suite de ce mémoire.

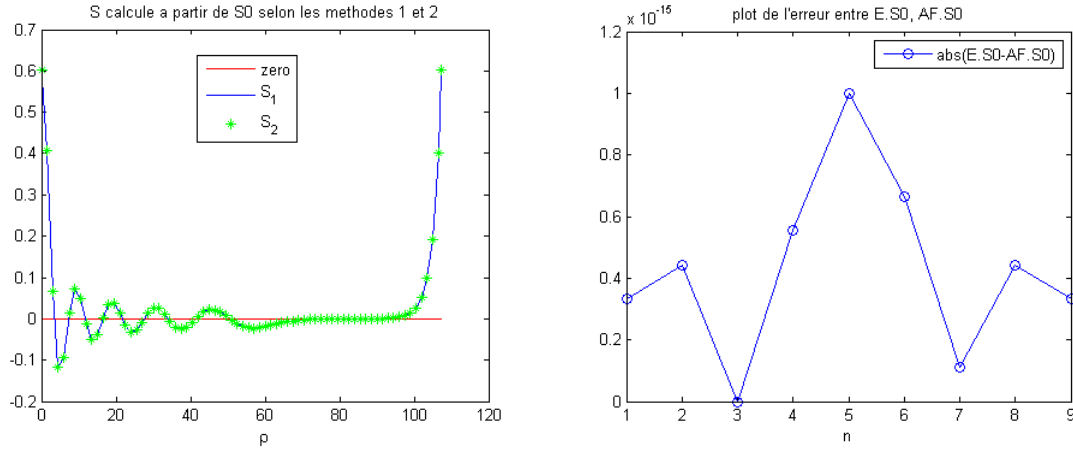


FIGURE 5.6 – Comparaison des méthodes. L'image de droite nous présente les erreurs absolues entre les S_0 tandis que l'image de gauche nous montre la solution S pour $n = 9$ rendue par les deux méthodes. On constate que les méthodes *intuitive* et *de minimisation* rendent des résultats quasiment identiques puisqu'on atteint la précision machine.

Une fois que nous avons trouvé nos solutions stationnaires normalisables, il est naturel de chercher à les normaliser. Nous avons déjà présenté la technique (voir (5.9)) pour y arriver :

$$\text{quand } \|S\|^2 = 4\pi \int \rho^2 S^2 d\rho, \text{ on effectue}$$

$$(S, V, E) \rightarrow \sigma^2 (S, V, E) \quad \text{où } \sigma = (\|S\|^2)^{-1}$$

$$r \rightarrow \sigma^{-1} r$$

Pour avoir un aperçu des changements, nous avons représenté sur la figure 5.7 une normalisation sur un des états stationnaires S . A gauche, se trouvent S , V et ρ lorsqu'aucune normalisation n'est effectuée ; l'image de droite nous les présente normalisés.

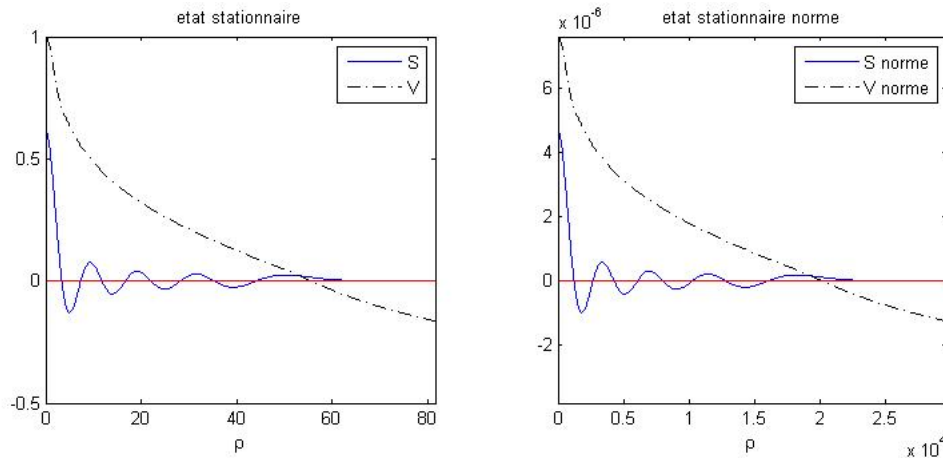


FIGURE 5.7 – Exemple de normalisation. L'image de droite nous montre la normalisation de la fonction représentée sur l'image de gauche.

Bien sûr, la normalisation a également une influence sur les conditions de départ. Par exemple, avec la normalisation effectuée précédemment, les conditions initiales se retrouvent déplacées, comme le montre

la figure 5.8. On constate bien que V_0 n'est plus fixé à la valeur 1 mais est multipliée par le facteur σ de normalisation.

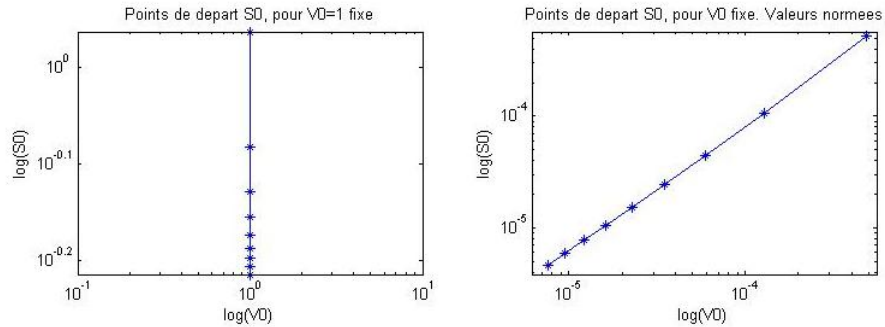


FIGURE 5.8 – Effet de la normalisation sur S_0 et V_0 . L'image de droite nous montre la normalisation des solutions S_0 et V_0 représentées sur l'image de gauche.

Puisque nous parlons des normalisations, arrêtons nous un instant sur le calcul des normes. Elles sont calculées numériquement à l'aide d'une méthode de trapèze sur un intervalle $[\rho_{init}, \rho_{max}]$. Il est alors légitime de se demander si on ne perd pas en précision en commençant le calcul en ρ_{init} plutôt qu'en 0. Après vérification, si ρ_{init} est suffisamment petit ($\rho_{init} = 0.00001$ par exemple), la perte de précision est minime, comme le montre la figure 5.9. Pour différentes solutions ($n = 1$ à 9), nous y avons représenté la différence entre la norme calculée et une borne supérieure de cette norme. Le résultat montre bien que la précision est correcte quand ρ_{init} est assez petit, puisqu'on atteint la précision machine.

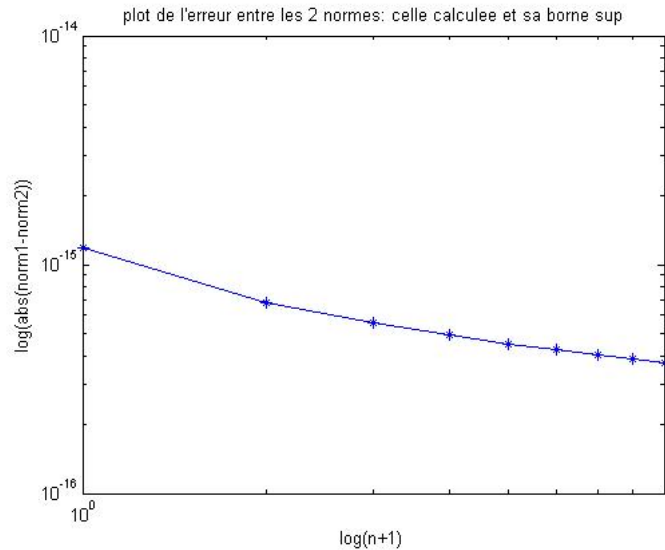


FIGURE 5.9 – Borne d'erreur absolue sur le calcul de la norme de S .

Nous allons à présent calculer les valeurs propres énergie associées à chaque solution stationnaire. Rappelons nous de l'équation 5.11 qui nous donnait deux expressions pour les énergies :

- $E = \frac{A}{(\|\Psi\|^2)^2}$ si aucune normalisation n'est effectuée auparavant.
- $E = A$ si les fonctions S et V ont déjà été normalisées.

Bien entendu, A se calcule par

$$A = V_0 - \int_0^\infty \tau S^2(\tau) d\tau$$

Ces deux approches rendent les mêmes résultats. La figure 5.10 nous présente ces énergies. A gauche, nous avons représenté A pour chaque solution stationnaire, sans aucune normalisation. Tandis qu'à droite, nous avons calculé $E = A$ après normalisation.

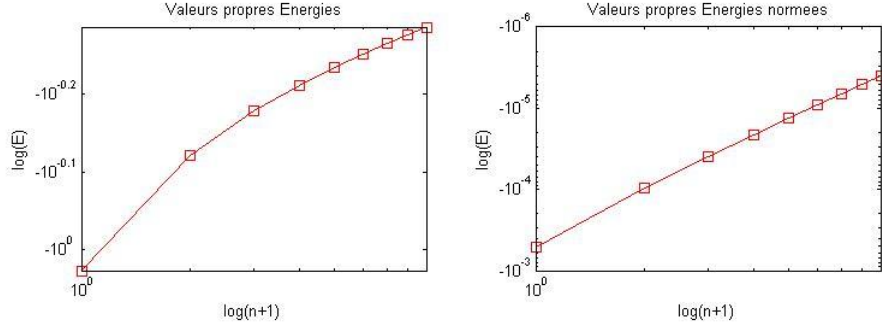


FIGURE 5.10 – Représentation de A à droite, sans normalisation ; et de l'énergie $\frac{A}{(\|\Psi\|^2)^2}$ après normalisation.

Avant de terminer cette analyse numérique des équations de Schrödinger-Newton, nous aimerions faire une remarque à propos de la sensibilité des systèmes. Nous avons vu plus haut, qu'il y avait deux modélisations possibles, *deriv2* et *deriv3*, pour lancer les intégrations numériques.

$A = [S, X, V, Y]$ où $X = (\rho S)'$, $Y = (\rho V)'$	$B = [S, Z, V, W]$ où $Z = (S)'$, $W = (V)'$
$A(1)' = \frac{A(2) - A(1)}{\rho}$	$B(1)' = B(2)$
$A(2)' = -\rho A(1)A(3)$	$B(2)' = -\frac{2B(2)}{\rho} - B(1)B(3)$
$A(3)' = \frac{A(4) - A(3)}{\rho}$	$B(3)' = B(4)$
$A(4)' = -\rho A(1)^2$	$B(4)' = -\frac{2B(4)}{\rho} - B(1)^2$

En théorie, ces deux systèmes sont identiques, mais en pratique la sensibilité de ces systèmes est telle qu'une différence est obtenue lors de l'intégration. Par exemple, la figure 5.11 nous montre qu'à partir d'un même point de départ, les deux systèmes d'équations vont donner des résultats différents.

Nous avons également implémenté un troisième système d'équation, nommé *deriv4*, pour calculer la norme de S au fur et à mesure du calcul de S . Cette idée semblait bonne jusqu'à ce qu'on se rende compte de la sensibilité du problème. Cette sensibilité est importante puisqu'elle induit, dans la recherche des solutions stationnaires, des différences de l'ordre 10^{-7} sur S_0 .

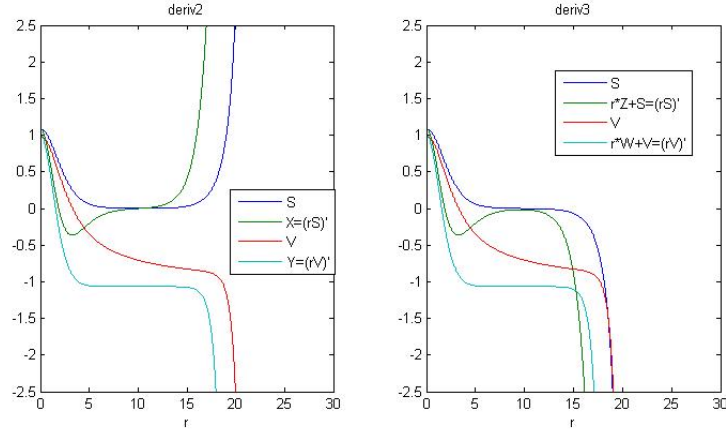


FIGURE 5.11 – On montre la sensibilité des systèmes en intégrant S et V pour $S_0 = 1.08865$, $V_0 = 1$ avec la modélisation *deriv2* sur l'image de gauche et *deriv3* sur l'image de droite.

Pour comprendre cela, revenons à la *méthode de minimisation*, où nous utilisons une fonction $Rmax$ à minimiser localement. Dans la dernière figure 5.12, nous avons représenté les trois fonctions $Rmax$ calculées à partir des trois systèmes d'équations. Sur l'image de gauche, on peut voir qu'à grande échelle, les trois minima semblent être les mêmes. Mais lorsqu'on se concentre sur un minimum, on se rend compte que les minima sont décalés les uns par rapport aux autres. En effet, leur position est

- en 0.700145360057018 pour *deriv2*,
- en 0.700145951170353 pour *deriv3* et
- en 0.700145135422606 pour *deriv4*.

soit des différences de l'ordre 10^{-7} .

Ces systèmes théoriquement équivalents s'avèrent donc très sensibles. Et cette sensibilité, conjointe à des méthodes de calculs différents, explique sans doute le décalage existants entre nos résultats et ceux d'autres sources ([9]). On se rend également compte que ce n'est pas une bonne chose de compliquer le système d'équations ; comme nous l'avons fait dans *deriv4* dans le but d'y ajouter le calcul de l'intégrale. Dans la suite, les normes seront calculées par la méthode des trapèzes et plus par intégration numérique.

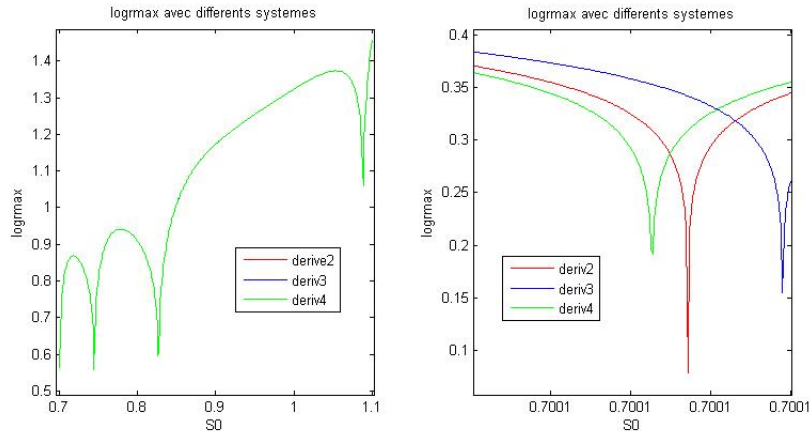


FIGURE 5.12 – On montre la sensibilité des systèmes via leurs fonctions $Rmax$. L'image de gauche nous montre qu'à grande échelle, les trois modélisations ne conduisent pas à de grandes différences puisque les minima sont toujours aux mêmes endroits. En revanche, lorsqu'on se concentre sur un minimum, on se rend compte du décalage existants entre les modélisations.

Influence de la masse

Nous nous intéressons à présent à l'interprétation de ces fonctions. Tout d'abord, nous allons retrouver notre état Ψ et notre potentiel Φ en utilisant le changement de variable (5.5) :

$$\begin{cases} \Psi = S \\ \Phi = E - V \end{cases}$$

Ensuite, nous allons utiliser le dimensionnement (5.3) pour trouver nos valeurs dimensionnées :

$$\left\{ \begin{array}{ll} r^* = \frac{r}{\delta} & \text{avec } \delta = \frac{8\pi G m^3}{\hbar^2} \left[\frac{1}{\mathbf{m}} \right] \\ \Psi^* = \frac{\Psi}{\alpha} & \alpha = \sqrt{\frac{1}{\delta^3}} \left[\sqrt{\mathbf{m}^3} \right] \\ \Phi^* = \frac{\Phi}{\beta} & \beta = \frac{1}{4\pi G m \delta} \left[\frac{s^2}{\mathbf{m}^2} \right] \\ E^* = \frac{E}{\epsilon} & \epsilon = \frac{\beta}{m} \left[\frac{s^2}{kg \mathbf{m}^2} \right] \\ t^* = \frac{t}{\gamma} & \gamma = \frac{1}{\hbar \epsilon} \left[\frac{1}{s} \right] \end{array} \right.$$

Enfin, il ne nous reste qu'à représenter graphiquement la fonction Ψ^* pour interpréter les solutions en terme de probabilités. Bien entendu, l'influence de la masse se fera à présent ressentir et nous pourrons vérifier, ou infirmer, l'hypothèse de Penrose.

Par Harrison ([10]), nous savons que le seul état stable parmi les solutions stationnaires est l'état fondamental, que nous avons représenté non dimensionné à la figure 5.13. Les autres solutions stationnaires sont instables et se désintègreront en l'état fondamental. A la figure 5.14, nous l'avons dimensionné pour une particule de la masse d'un électron. Dans les figures suivantes, nous avons recommencé ce processus de dimensionnement pour une masse d'un proton et d'un chat.

On peut clairement constater l'influence de la masse dans ces dimensionnements. La forme des fonctions Ψ^* et Φ^* n'est pas modifiée mais il est intéressant d'analyser les échelles des axes.

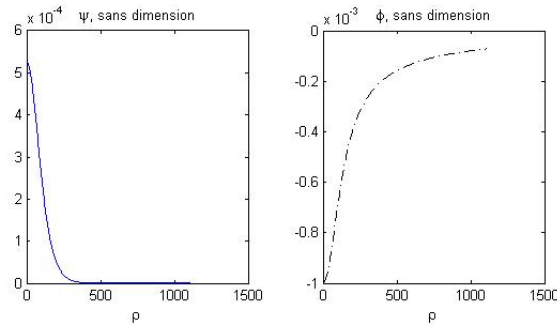


FIGURE 5.13 – Exemple d'un système (état Ψ et potentiel Φ) non dimensionné.

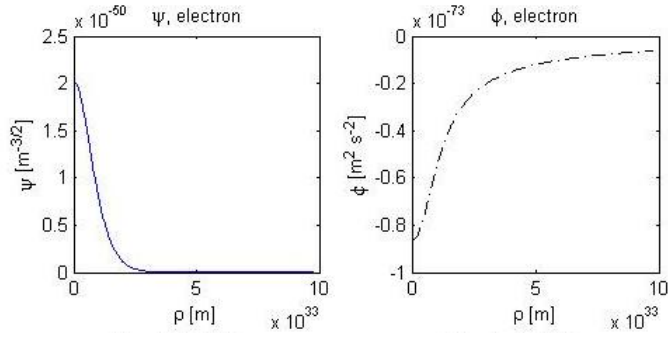


FIGURE 5.14 – Etat Ψ^* et potentiel Φ^* dimensionnés pour un électron (masse $9.10938215 \cdot 10^{-31} [kg]$ [14]).

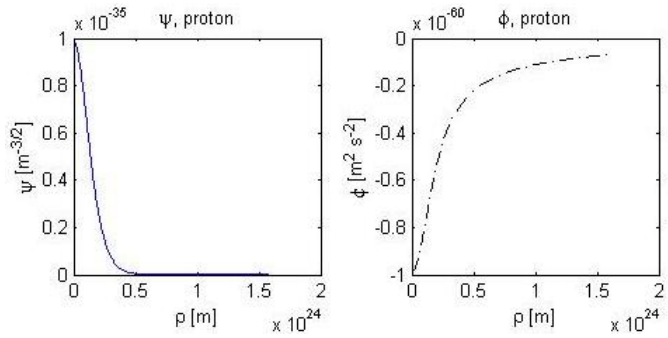


FIGURE 5.15 – Etat Ψ^* et potentiel Φ^* dimensionnés pour un proton (masse $1.672621637 \cdot 10^{-27} [kg]$ [14]).

Qu'en est-il de l'interprétation probabiliste ? La probabilité de présence de la particule entre ρ_1 et ρ_2 se calcule par :

$$\mathcal{P}([\rho_1 \rho_2]) = \int_{\rho_1}^{\rho_2} |\Psi|^2 (4\pi\rho^2) d\rho$$

Comme $(4\pi\rho^2) d\rho$ est relié au calcul de l'élément de volume, nous considérerons que c'est l'expression $|\Psi(\rho)|^2$ qui nous donne la densité de probabilité d'observer la particule en ρ . Et puisque la fonction Ψ est réelle dans notre cas, il nous suffit d'étudier Ψ^2 .

Pour un électron par exemple, on se rend compte que sa densité de probabilité est très faible mais très étendue. Pour information, la taille de l'univers observable est de $10^{26}[m]$. Ce qui signifie, si l'on veut mesurer la position de l'électron, qu'il existe une probabilité infime, mais non nulle, de l'observer en n'importe quel point de l'espace observable. Autrement dit, les auto-interactions engendrées par l'équation de Poisson n'ont pas beaucoup d'influence sur cette particule quantique. Elles peuvent donc être complètement négligées à l'échelle quantique. Nous retrouvons alors l'équation de Schrödinger en lieu et place des équations de Schrödinger-Newton.

Pour une particule de la masse d'un chat, par contre, la figure 5.16 nous montre qu'elle sera très précisément située dans l'espace. En effet, son pic de probabilité est de l'ordre de $10^{-59}[m]$, alors que la taille d'un proton est de $10^{-15}[m]$. Théoriquement, il est toujours possible de mesurer le chat déplacé d'un millimètre; mais cette probabilité est si infime qu'elle en devient négligeable. Les équations de Schrödinger-Newton prédisent donc que les objets macroscopiques sont parfaitement situés et donc en état de décohérence, sans superposition envisageable. Ceci confirme parfaitement l'hypothèse de Penrose selon laquelle les équations de Schrödinger-Newton feraient le lien entre les mondes quantiques et macroscopiques.

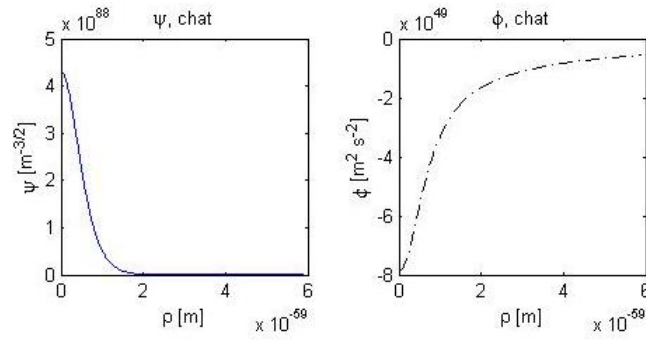


FIGURE 5.16 – Etat Ψ^* et potentiel Φ^* dimensionnés pour un chat (masse 5 [kg]).

Il est permis de se demander à quelle masse correspondrait une densité de probabilité $|\Psi|^2$ avec un pic d'un millimètre de rayon. Dans la figure 5.17, nous avons représenté une telle densité et constaté qu'elle correspondait à une masse de 10^{-18} [kg]. Pour information, la masse d'un petit virus est de l'ordre de 10^{-20} [kg] et celle d'une bactérie de 10^{-16} [kg]. Selon nos résultats, un virus devrait donc présenter un léger comportement quantique. Nous obtenons là un ordre de grandeur qui semble être la charnière entre les deux mondes, ouvrant la porte à de possibles confirmations expérimentales.

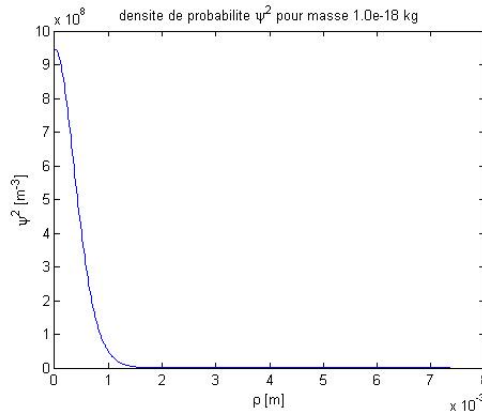


FIGURE 5.17 – Densité de probabilité dimensionnée pour une masse de 10^{-18} [kg]. L'énergie associée est $-6.5047 \cdot 10^{-44}$ [Joule]

Solution analytique de l'équation de Schrödinger

Avant de clôturer ce chapitre, nous allons nous pencher sur les solutions de l'équation de Penrose pour tenter de les comparer aux résultats obtenus ci-dessus. Ecrivons l'équation stationnaire pour une particule libre de masse m , en symétrie sphérique :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho} (\rho \Psi(\rho))'' = E \Psi(\rho) \quad (5.14)$$

En notant $\xi(\rho) = \rho \Psi(\rho)$, nous obtenons l'expression suivante à résoudre :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\xi(\rho))'' = E \xi(\rho)$$

La solution générale de cette équation s'écrit

$$\xi(\rho) = A e^{iC\rho} = B \cos(C\rho) + D \sin(C\rho) \quad \text{où} \quad C^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Ainsi, nous obtenons des solutions différentes en fonction de l'énergie :

- si l'énergie E est nulle, l'état est :

$$\Psi(\rho) = \frac{B}{\rho}$$

- si l'énergie est positive, notre état est oscillant :

$$\Psi(\rho) = \frac{B}{\rho} \cos\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \rho\right) + \frac{D}{\rho} \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \rho\right)$$

- et si l'énergie est négative, l'état s'écrit :

$$\Psi(\rho) = \frac{B}{\rho} \cosh\left(\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \rho\right) + \frac{D}{\rho} \sinh\left(\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \rho\right)$$

On constate qu'aucune de ces solutions n'est normalisable, car elles divergent soit en l'origine, soit en l'infini. Il n'existe donc pas d'état acceptable pour l'équation de Schrödinger stationnaire d'une particule libre en symétrie sphérique. Il est donc toujours nécessaire d'ajouter une influence quelconque pour obtenir une solution à l'équation de Schrödinger.

Rappelons-nous un instant de la solution obtenue à la section précédente pour un électron : sa fonction d'onde est si étalée dans l'espace qu'on peut l'approximer par une fonction nulle. Or cette fonction nulle est belle et bien solution de notre équation de Schrödinger (5.14). Il est donc clair que les équations de Schrödinger-Newton à l'échelle quantique peuvent être remplacées par l'équation de Schrödinger, confirmant l'intuition de Penrose.

Chapitre 6

Etude pour deux particules

Toute l'étude ci-dessus ne porte que sur une seule particule, quelque soit sa masse. Un chat pourrait alors être considéré comme une grosse particule régie par les équations de Schrödinger-Newton. Cette manière de modéliser le monde pourrait être efficace, mais elle est bien peu élégante. En effet, un chat se compose en général de plus d'une particule, et il serait intéressant d'étudier les interactions des particules entre elles. Pour ce faire, nous avons besoin d'une équation de Schrödinger-Newton adaptée aux systèmes à plusieurs particules. Nous avons envisagé deux formulations particulières, dont la première est inspirée de la décomposition de l'équation de Schrödinger selon le centre de masse alors que la deuxième provient d'une expression proposée par Diosi.

Comme pour notre étude à une particule, nous nous restreignons à l'étude d'équations stationnaires, en symétrie sphérique et pour des masses ponctuelles. Ceci nous conduira à trouver les différentes solutions stationnaires. Nous pourrons alors chercher à comparer ces deux décompositions.

6.1 Décomposition selon le centre de masse

L'expression des équations de Schrödinger-Newton proposée dans cette section est une proposition originale pour ce mémoire qui s'inspire de la décomposition de l'équation de Schrödinger selon le centre de masse. Les auto-interactions sont ensuite rajoutées à l'aide d'équations de Poisson. Nous pourrons ensuite intégrer numériquement ce système double, d'une manière analogue à ce qui a été fait pour une particule. Nous trouverons enfin divers états stationnaires, associés à leurs énergies. L'état collapsé fondamental sera à nouveau l'état de plus basse énergie. Nous constaterons également que le rapport des masses des deux particules revêt une importance particulière dans cette étude.

Mais avant cela, nous allons expliciter la décomposition de l'équation de Schrödinger selon le centre de masse.

L'équation de Schrödinger

Nous avons déjà vu comment exprimer l'équation de Schrödinger pour plusieurs particules (4.4).

Nous allons donc appliquer cette expression à notre système à deux particules, représenté par l'état $\Psi(r_1, r_2) \in L^2(\mathbb{R}^6)$. L'équation de Schrödinger s'écrit donc :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + U(r_1, r_2) \right) \Psi(r_1, r_2) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r_1, r_2, t) \{ = E\Psi(r_1, r_2) \}$$

où l'expression stationnaire est reprise entre crochet. Nous voulons à présent séparer cette équation en deux équations plus simples [13]. Pour ce faire, commençons par nous placer dans le référentiel du centre de masse :

$$\begin{cases} s &= r_2 - r_1 \\ R &= \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 + m_2} \end{cases} \quad (6.1)$$

où R nous donne la position du centre de masse ; et où s est lié à la distance inter-particules et repère ce qu'on appellera la particule fictive.

[HYPOTHÈSE] Supposons que l'état peut se décomposer sous la forme suivante

$$\Psi(r_1, r_2, t) = \Psi(s, R, t) = \Psi_s(s, t) \Psi_R(R, t)$$

avec $\Psi_s, \Psi_R \in L^2(\mathbb{R}^3)$. Et supposons que l'énergie potentielle $U(s, R)$ est la somme d'énergies potentielles indépendantes :

$$U(s, R) = U_s(s) + U_R(R)$$

Dans ce cas, l'équation de Schrödinger peut se découpler pour donner :

$$\begin{cases} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 + U_R(R) \right) \Psi_R(R, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \Lambda \right) \Psi_R(R, t) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_s^2 + U_s(s) \right) \Psi_s(s, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \Lambda \right) \Psi_s(s, t) \end{cases} \quad (6.2)$$

où Λ est la constante de couplage, $M = m_1 + m_2$ et $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$. Les laplaciens ∇_s^2 et ∇_R^2 se calculent toujours de la même manière, mais dans leur coordonnées respectives :

$$\begin{aligned} \nabla_s^2 &= \frac{\partial^2}{\partial x_s^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_s^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_s^2} & s &= x_s e_x + y_s e_y + z_s e_z \\ \nabla_R^2 &= \frac{\partial^2}{\partial x_R^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_R^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_R^2} & R &= x_R e_x + y_R e_y + z_R e_z \end{aligned}$$

Les états Ψ_s et Ψ_R dépendent encore du temps. Pour trouver l'expression stationnaire, on effectue la substitution suivante :

$$\begin{cases} \Psi_s(s, t) &= \Psi_s(s) \exp\left(-\frac{i(E_s - \Lambda)}{\hbar} t\right) \\ \Psi_R(R, t) &= \Psi_R(R) \exp\left(-\frac{i(E_R + \Lambda)}{\hbar} t\right) \end{cases}$$

Où E_s et E_R deviendront les énergies associées respectivement au système de la particule fictive et du centre de masse. Bien sûr, l'état total doit aussi être stationnaire : $\Psi(s, R, t) = \Psi(s, R) \exp\left(-\frac{iE}{\hbar} t\right)$.

On trouve donc la relation suivante $E_R + E_s = E$ qui lie les équations en lieu et place de la constante de liaison. Nos équations de Schrödinger deviennent donc, dans le cas stationnaire :

$$\begin{cases} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 + U_R(R) \right) \Psi_R(R) = E_R \Psi_R(R) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_s^2 + U_s(s) \right) \Psi_s(s) = E_s \Psi_s(s) \\ E = E_s + E_R \end{cases} \quad (6.3)$$

Avant de continuer, analysons l'influence du changement de variable sur la norme. La norme se calcule de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \|\Psi\|^2 &= \int_{\mathbb{R}^6} |\Psi(r_1, r_2)|^2 dr_1 dr_2 \\ &= \det(J) \int_{\mathbb{R}^6} |\Psi_R(R) \Psi_s(s)|^2 dR ds \quad \text{avec } J = \left(\frac{\partial(r_1, r_2)}{\partial(s, R)} \right) \end{aligned}$$

Dans notre cas, $J = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{3 \times 3} & -\frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbb{I}_{3 \times 3} \\ \mathbb{I}_{3 \times 3} & \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbb{I}_{3 \times 3} \end{pmatrix}$ et son déterminant vaut l'unité. La norme peut donc se calculer comme suit :

$$\|\Psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi_s(s)|^2 ds \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi_R(R)|^2 dR = \|\Psi_s\|^2 \|\Psi_R\|^2$$

Ajout d'auto-interactions

Dans le cas d'un système quantique composé d'une seule particule, on a vu que l'équation de Poisson induisait une action de la particule sur elle-même. Avec deux particules, on s'attend à ce qu'il y ait plusieurs types d'interaction : les self-interactions de chacune des particules sur elles-mêmes et l'action que chaque particule a sur l'autre. Pour prendre en compte ces différentes actions, nous avons décidé de considérer le système selon les variables du centre de masse. Nous connaissons déjà les expressions (6.2) et (6.3) pour l'équation de Schrödinger :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 + U_R \right) \Psi_R = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \Lambda \right) \Psi_R \quad \{= E_R \Psi_R\} \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_s^2 + U_s \right) \Psi_s = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \Lambda \right) \Psi_s \quad \{= E_s \Psi_s\} \\ \{E = E_R + E_s\} \end{array} \right.$$

où l'expression stationnaire a été ajoutée entre accolades. Dans une étude classique, le centre de masse serait considéré comme une particule libre, c'est-à-dire $U_R = 0$, puisque les forces inter-particules ne dépendent que de la distance entre les particules, c'est-à-dire de s [13]. Ainsi, seule la particule fictive sera soumise à un potentiel U_s , que nous interprétons comme l'influence du centre de masse sur la particule fictive. Reprenons donc nos équations de Schrödinger :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \Psi_R = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \Lambda \right) \Psi_R \quad \{= E_R \Psi_R\} \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_s^2 + U_s \right) \Psi_s = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \Lambda \right) \Psi_s \quad \{= E_s \Psi_s\} \\ \{E = E_R + E_s\} \end{array} \right.$$

Il nous reste à ajouter les auto-interactions à ces deux équations de Schrödinger.

[HYPOTHÈSE] Nous allons à présent singer (5.1). Le centre de masse sera soumis à un potentiel Φ_R d'auto-interaction, généré par une équation de Poisson. Autrement dit, le centre de masse est soumis aux équations de Schrödinger-Newton usuelles, comme on peut le voir ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 + M\Phi_R \right) \Psi_R = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \Lambda \right) \Psi_R \quad \{= E_R \Psi_R\} \\ \nabla_R^2 \Phi_R = 4\pi G M |\Psi_R|^2 \end{array} \right. \quad (6.4)$$

Par contre, la particule fictive, de position s , devra ressentir ce potentiel généré par le centre de masse. Le potentiel $\Phi_s = \frac{U_s}{\mu}$ qui régit la particule fictive doit donc se composer d'un terme traduisant cette influence du centre de masse et d'un autre terme provenant de l'auto-interaction de la particule fictive sur elle-même. Nous postulons que la particule fictive, si elle est dans la position s , ressent le potentiel¹ Φ_R en cette position s : $\Phi_R(R=s)$.

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_s^2 + \mu\Phi_s \right) \Psi_s = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \Lambda \right) \Psi_s \quad \{= E_s \Psi_s\} \\ \Phi_s(s,t) = \Phi_R(R=s,t) + \phi_s(s,t) \\ \nabla_s^2 \phi_s = 4\pi G \mu |\Psi_s|^2 \end{array} \right. \quad (6.5)$$

Penchons-nous quelque peu sur l'interprétation d'une telle expression des équations. Pour un système de deux particules, le centre de masse est repéré par un vecteur R et le vecteur s repère ce qu'on appelle la particule fictive. Si ces deux vecteurs appartiennent au même espace \mathbb{R}^3 , ils n'ont pas le même point de départ, comme le montre la figure 6.1.

1. Cette hypothèse s'inspire de l'influence du centre de masse sur la particule fictive qui existe dans le cas classique avec des masses ponctuelles.

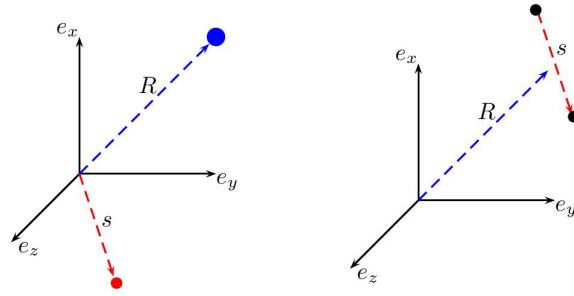


FIGURE 6.1 – A gauche, les vecteurs R et s sont représentés dans le même espace avec la même origine. A droite, on a représenté la situation réelle, avec la position des particules.

En mécanique quantique, les particules ne peuvent pas être situées aussi précisément. Leur probabilité de présence est donnée par la fonction d'état. Ainsi l'expression $|\Psi_R(R)|^2$ nous fournira la probabilité de trouver le centre de masse en un point R de l'espace. Il y a donc une incertitude sur la position du centre de masse. Et cette incertitude ($|\Psi_R|^2$) génère le potentiel Φ_R , via l'équation de Poisson. La particule fictive ressent ce potentiel extérieur, en plus de son propre potentiel ϕ_s .

Résultats

Nous réécrivons ci-dessous les équations de Schrödinger-Newton stationnaires :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{R^*}^2 + M\Phi_R^* \right) \Psi_R^* = E_R^* \Psi_R^* \\ \nabla_{R^*}^2 \Phi_R^* = 4\pi G M |\Psi_R^*|^2 \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{s^*}^2 + \mu\Phi_s^* \right) \Psi_s^* = E_s^* \Psi_s^* \\ \Phi_s^*(s) = \Phi_R^*(R=s) + \phi_s^*(s) \\ \nabla_{s^*}^2 \phi_s^* = 4\pi G \mu |\Psi_s^*|^2 \end{array} \right. \quad (6.6)$$

A nouveau, nous avons ajouté des étoiles pour nous souvenir que ces grandeurs portent des unités. Les mêmes grandeurs sans étoiles devront être considérées sans dimensions.

Pour résoudre numériquement ces équations, il nous faudra retirer les dimensions, puis passer en symétrie sphérique. Ces développements sont similaires à ceux effectués dans l'étude pour une particule, et le lecteur studieux pourra les trouver dans l'annexe A, page 95. Dans cette section, nous nous bornerons à présenter les résultats obtenus.

Néanmoins, plusieurs hypothèses ont été posées tout au long de ces développements et il n'est pas inutile de les rappeler :

- [HYPOTHÈSE] Les fonctions d'états Ψ_R et Ψ_s sont supposées réelles.
- [HYPOTHÈSE] Suivant la valeur que l'on attribue à ϕ_{s_0} , on peut toujours trouver des solutions stationnaires. Néanmoins, il nous faut fixer cette valeur pour permettre l'intégration numérique, nous la posons donc à $\phi_{s_0} = \frac{M}{\mu} (E_s - 1) - \Phi_{R=s}(0)$ pour Φ_{R_0} fixé à $E_R - 1$.
- [HYPOTHÈSE] Pour le caractère lisse des fonctions, on impose $\Psi'_{R/s}(0) = \Phi'_{R/s}(0) = \phi'_s(0) = 0$.

Selon (6.6), les équations régissant le centre de masse sont exactement les mêmes que les équations de Schrödinger-Newton à une particule. Nous connaissons donc déjà les solutions stationnaires pour le centre

de masse. A partir de là, on trouve facilement Φ_R qu'on injecte dans les équations pour la particule fictive. Il ne reste qu'à intégrer ces équations-là.

Néanmoins, une difficulté s'est présentée lorsque nous avons voulu injecter $\Phi_{R=s}$ dans le système de la particule fictive. En effet, Φ_R est défini sur un intervalle $\rho_R \in [\rho_{R_{init}} \rho_{R_{end}}]$. Par exemple, la solution stationnaire fondamentale du centre de masse est définie sur un intervalle $[0 \ 30]$ (voir figure 6.2).

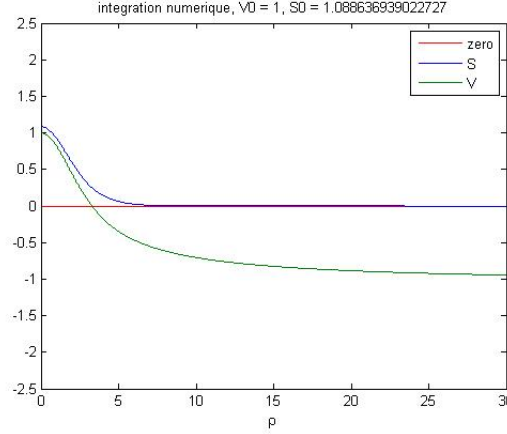


FIGURE 6.2 – Solution stationnaire fondamentale du centre de masse. C'est la même que dans le cas à une particule.

Or il apparaît que la particule fictive varie sur un intervalle plus grand $[\rho_{s_{init}} \rho_{s_{end}}]$. Et si l'expression de $\Phi_{R=s}$ nous est inconnue entre $[\rho_{R_{end}} \rho_{s_{end}}]$, nous ne pouvons pas calculer Ψ_s et ϕ_s au-delà de $\rho_{R_{end}}$. Heureusement, nous pouvons approximer le comportement de Φ_R quand Ψ_R est nul. En effet, souvenons-nous de l'équation de Poisson pour le potentiel Φ_R :

$$\nabla_R^2 \Phi_R = |\Psi_R|^2$$

Lorsque $\rho_R > \rho_{R_{end}}$, on sait que l'état Ψ_R tombe à zéro. Selon l'équation de Poisson, le potentiel sera alors de l'ordre $1/\rho_R$. Nous pouvons donc approximer Φ_R au-delà de $\rho_{R_{end}}$, comme le montre la figure 6.3.

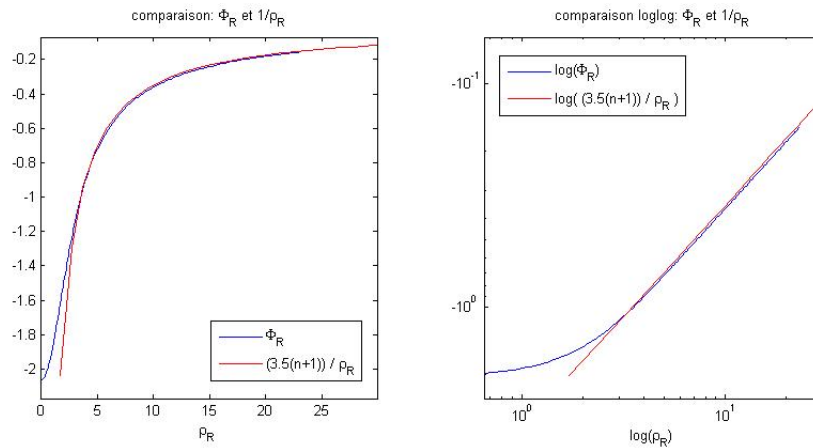


FIGURE 6.3 – Lorsque Ψ_R tombe à zéro, Φ_R se comporte comme une fonction en $1/\rho_R$, comme on peut le voir sur l'image de gauche. L'image de droite nous montre ces mêmes fonctions en logarithme.

Nous aurions également pu choisir d'intégrer tout le système (6.6) d'un seul tenant. Cela nous aurait évité de réinjecter Φ_R sous forme de vecteur dans le second système. Cette méthode n'a pas été implémentée car nous aurions eu le même type de problème avec les intervalles : l'intégration sur R , finissant plus tôt, aurait stoppé l'intégration sur s . De plus, nous avons vu précédemment que ce n'était pas une bonne idée de surcharger les systèmes numériques à cause de la sensibilité de l'intégration.

Nous allons à présent étudier les solutions stationnaires pour la particule fictive. A partir d'ici, tout se complique. Dans notre étude pour une particule, nous ne considérons la masse qu'à la fin, pour redimensionner les valeurs obtenues. Mais à présent, le rapport $\frac{\mu}{M}$ des deux systèmes est important. Or ce coefficient est relié au rapport des masses :

$$\frac{\mu}{M} = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} = \left(l + \frac{1}{l} + 2\right)^{-1} \text{ pour } l = \frac{m_2}{m_1}$$

Cela signifie que le rapport des masses devra être pris en compte dans notre étude des solutions non dimensionnées. Tant que nous manipulerons les grandeurs sans unités, seul ce rapport sera important. Les masses elles-mêmes n'interviendront que lors du dimensionnement (pour le dimensionnement : voir (A.4), page 96). Nous aurons donc plusieurs paramètres à gérer dans cette étude : le **rapport des masses** et le **choix de Ψ_{R_0}** qui nous donne la solution stationnaire du centre de masse.

► Posons tout d'abord que l'état du centre de masse est l'état fondamental et cherchons les états stationnaires pour la particule fictive. Dans un premier temps, les masses seront égales : $l = 1$.

La figure 6.4 nous montre que la première solution pour la particule fictive ressemble à l'état fondamental que nous connaissons. Dans cette figure, nous avons déjà normalisé les fonctions (pour la normalisation : voir (A.2), page 95). Par similitude avec l'étude effectuée pour une particule, nous associerons à chaque solution stationnaire $\Psi_{R/s}$ un $n_{R/s}$ déterminant le nombre de fois que la fonction traverse l'axe des abscisses.

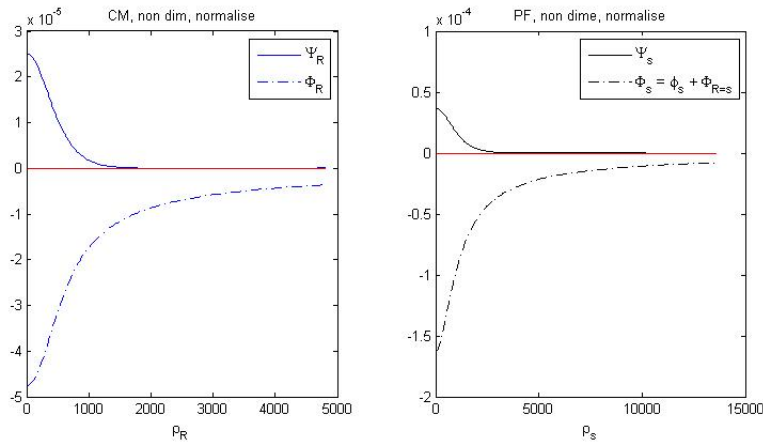


FIGURE 6.4 – Cas où $l = 1$ et où le centre de masse est dans son état fondamental ($n_R = 0$). On peut y voir la solution $n_s = 0$ pour la particule fictive. Les fonctions ont été normalisées, mais pas dimensionnées.

Nous pouvons maintenant chercher les états stationnaires ultérieurs. Par exemple, nous pouvons représenter l'état $n_s = 4$ pour la particule fictive (voir figure 6.5). On se rend vite compte que, comme dans le cas pour une seule particule, il existe une infinité d'états stationnaires.

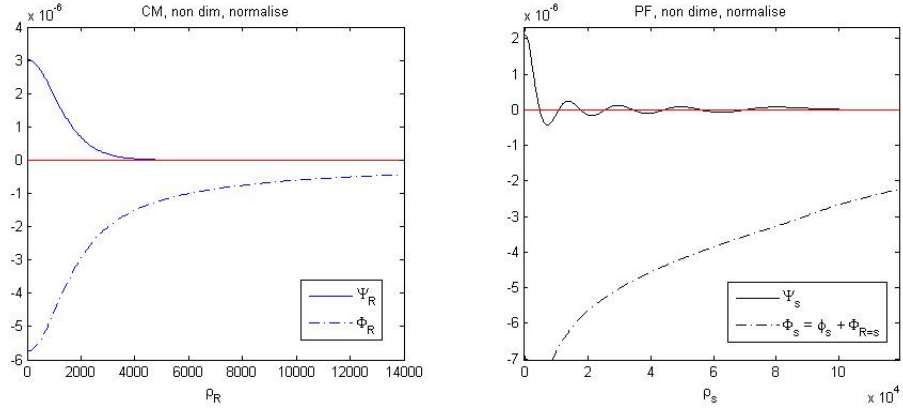


FIGURE 6.5 – Cas où $l = 1$ et où le centre de masse est dans son état fondamental ($n_R = 0$). On peut y voir la solution $n_s = 8$ pour la particule fictive. Les fonctions ont été normalisées, mais pas dimensionnées.

Nous pouvons alors étudier les énergies associées à nos solutions (voir figure 6.6). On peut voir que toutes les énergies pour la particule fictive sont légèrement plus élevées que l'énergie fondamentale du centre de masse. A partir de ces énergies, nous pouvons calculer l'énergie totale du système : $E = E_s + E_R$. Rappelons encore que nous manipulons des grandeurs sans unité. Notre but est de savoir quelles solutions seront associées à l'énergie minimale. Le dimensionnement revient à appliquer le même facteur à E_s et à E_R , ce qui ne modifiera pas leur rapport. Nous reprenons les énergies normées dans le tableau ci-dessous :

n_s	E_s normée	E_R normée	E normée
0	-0.176352252650016e-4	-0.245798877870660e-4	-0.422151130520676e-4
1	-0.054799010698730e-4	-0.129445100108890e-4	-0.184244110807620e-4
2	-0.030349487323976e-4	-0.086619301515800e-4	-0.116968788839776e-4
3	-0.020574526913819e-4	-0.065294496167761e-4	-0.085869023081580e-4
4	-0.015416290869937e-4	-0.052483454686044e-4	-0.067899745555981e-4
5	-0.012261534925240e-4	-0.043936930806289e-4	-0.056198465731529e-4
6	-0.010144620024793e-4	-0.037830311386506e-4	-0.047974931411298e-4
7	-0.008631636555177e-4	-0.033244131680081e-4	-0.041875768235258e-4
8	-0.007498973799109e-4	-0.029671440087002e-4	-0.037170413886111e-4

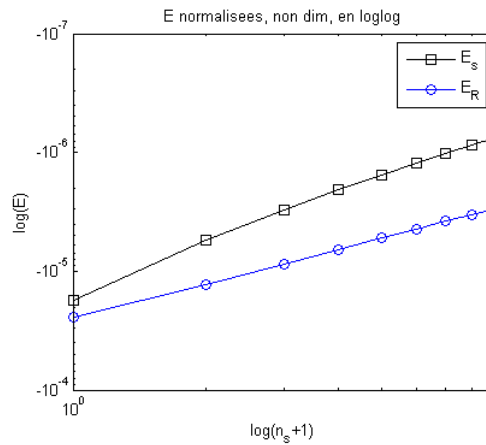


FIGURE 6.6 – Cas où $l = 1$ et où le centre de masse est dans son état fondamental ($n_R = 0$). Représentation des énergies normalisées.

► Nous allons à présent changer l'état stationnaire du centre de masse. On choisit le deuxième état stationnaire ($n_R = 1$). A la figure 6.7, on peut vérifier que notre approximation pour la fonction Φ_R est toujours correcte.

On peut alors intégrer le système pour la particule fictive et en tirer ses états stationnaires. L'état $n_s = 8$ est représenté à la figure 6.8.

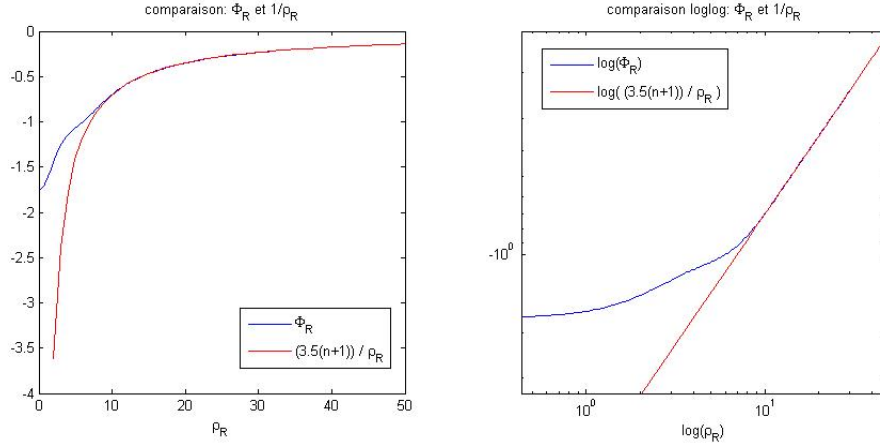


FIGURE 6.7 – On peut voir sur la figure de gauche que notre fonction en $1/\rho$ est toujours une bonne approximation de Φ_R à la fin de son intervalle. L'image de droite nous montre ces mêmes fonctions en logarithme.

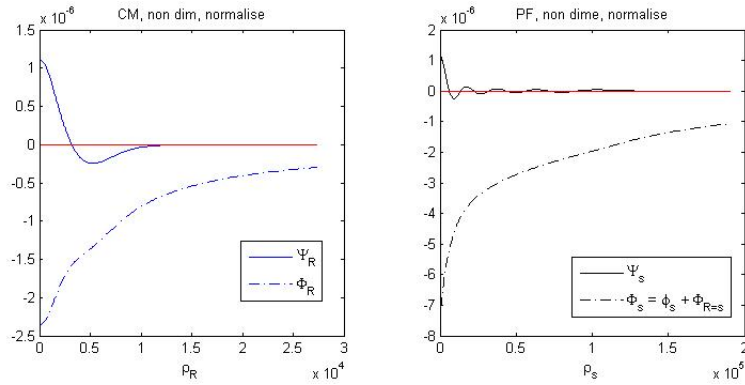


FIGURE 6.8 – Cas où $l = 1$ et où $n_R = 1$. On peut y voir la solution $n_s = 8$ pour la particule fictive. Les fonctions ont été normalisées, mais pas dimensionnées.

Les énergies quant à elles sont représentées à la figure 6.9. Le tableau ci-dessous reprend les valeurs de ces énergies :

n_s	E_s normée	E_R normée	E normée
0	-0.102029297937517e-4	-0.072731277545785e-4	-0.174760575483302e-4
1	-0.034163663070518e-4	-0.043382664213434e-4	-0.077546327283953e-4
2	-0.018750816828742e-4	-0.029666441144990e-4	-0.048417257973732e-4
3	-0.012552872431427e-4	-0.022440111693555e-4	-0.034992984124982e-4
4	-0.009311839387668e-4	-0.018050968393367e-4	-0.027362807781035e-4
5	-0.007347793308631e-4	-0.015107597880585e-4	-0.022455391189217e-4
6	-0.006041284025501e-4	-0.012998818773553e-4	-0.019040102799054e-4
7	-0.005113881033691e-4	-0.011413948819081e-4	-0.016527829852772e-4
8	-0.004423952320483e-4	-0.010179240357406e-4	-0.014603192677889e-4

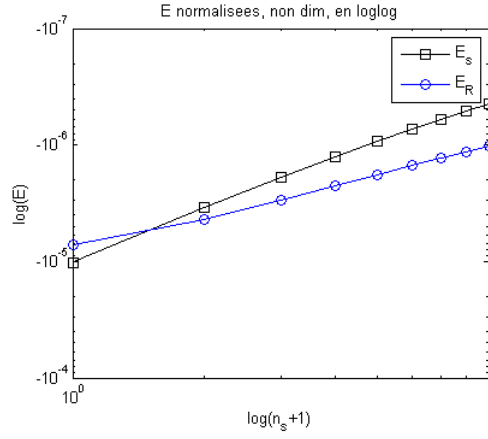


FIGURE 6.9 – Cas où $l = 1$ et où $n_R = 1$. Représentation des énergies normalisées.

On remarque que, quand $n_s > n_R$, l'énergie de la particule fictive est plus élevée que celle du centre de masse. Cette relation reste vraie quelque soit n_R . Pour l'illustrer, nous avons représenté à la figure 6.10, le cas $n_R = 7$. Les deux courbes se croisent quand $n_s < n_R$.

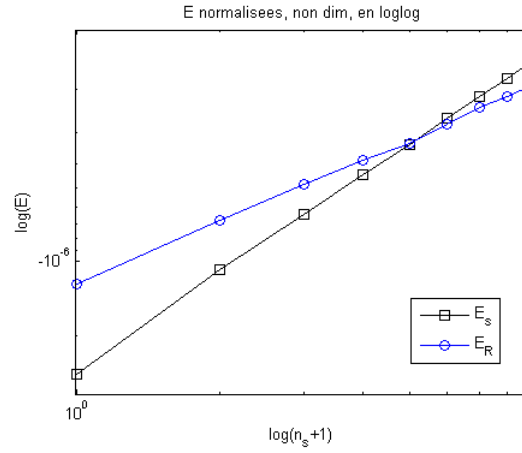


FIGURE 6.10 – Cas où $l = 1$ et où $n_R = 7$. Représentation des énergies normalisées.

Avant de passer à la suite, considérons un peu plus longtemps les énergies dans ces trois cas : $n_R = 0, 1$ et 7 . Nous représentons à la figure 6.11 les énergies totales $E_s + E_R$ pour ces trois cas et pour les différentes valeurs de n_s . On constate que l'état avec l'énergie la plus basse est l'état fondamental correspondant à $n_R = 0 = n_s$.

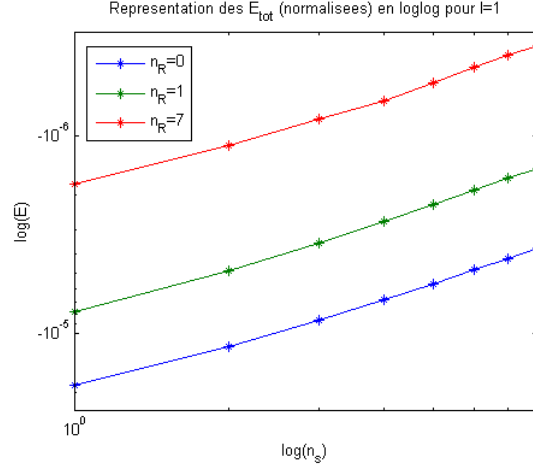


FIGURE 6.11 – Représentation des énergies totales normalisées.

► Voyons à présent ce qui se passe lorsqu’une masse est 100 fois plus importante que l’autre. Reprenons l’état fondamental pour le centre de masse et voyons les effets que les masses vont avoir sur nos solutions. La figure 6.12, à comparer avec la figure 6.5, nous montre que ce changement influence l’ordre de grandeur entre Ψ_R et Ψ_s . L’amplitude de la fonction d’onde pour la particule fictive Ψ_s est approximativement 5 fois supérieure à celle pour le centre de masse.

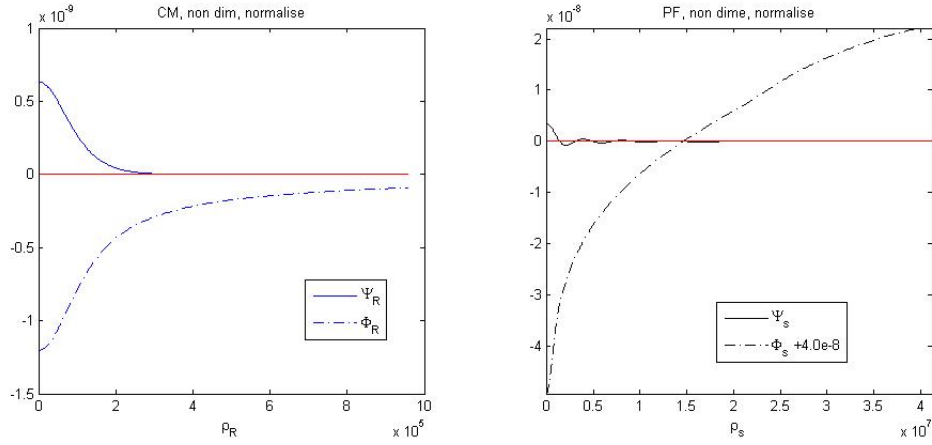


FIGURE 6.12 – Cas où $l = 100$ et où le centre de masse est dans son état fondamental ($n_R = 0$). On peut y voir la solution $n_s = 8$ pour la particule fictive. Le potentiel Φ_s a été déplacé pour apparaître sur l’image. Les fonctions ont été normalisées, mais pas dimensionnées.

De même, la figure 6.13, à comparer avec la figure 6.6, nous montre l’effet sur les énergies : on remarque que E_s se rapproche de E_R pour $n_s = 1$ (quand $n_R = 1$). Autrement dit, augmenter le rapport des masses rapproche les énergies E_s et E_R dans le cas $n_s = n_R$.

Le tableau ci-dessous reprend les valeurs des énergies :

n_s	E_s normée	E_R normée	E normée
0	-0.485858790812140e-8	-0.495264177211108e-8	-0.981122968023249e-8
1	-0.177936768223294e-8	-0.255478145495138e-8	-0.433414913718432e-8
2	-0.106218007032574e-8	-0.173966686977880e-8	-0.280184694010454e-8
3	-0.074992624931724e-8	-0.132682066492107e-8	-0.207674691423831e-8
4	-0.057667223988815e-8	-0.107610421986698e-8	-0.165277645975512e-8
5	-0.046701521892429e-8	-0.090713134326935e-8	-0.137414656219364e-8
6	-0.039159043358630e-8	-0.078524401133211e-8	-0.117683444491841e-8
7	-0.033664274370238e-8	-0.069303064568036e-8	-0.102967338938274e-8
8	-0.029489230413647e-8	-0.062073228200336e-8	-0.091562458613983e-8

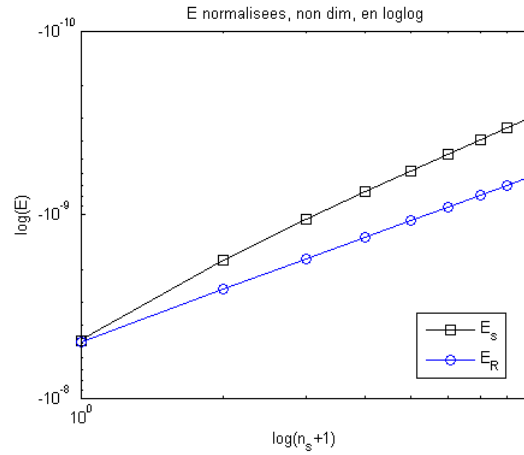


FIGURE 6.13 – Cas où $l = 100$ et où le centre de masse est dans son état fondamental ($n_R = 0$). Représentation des énergies normalisées.

► Changeons à nouveau l'état stationnaire du centre de masse pour $n_R = 1$. Les états sont représentés à la figure 6.14, à comparer avec 6.8.

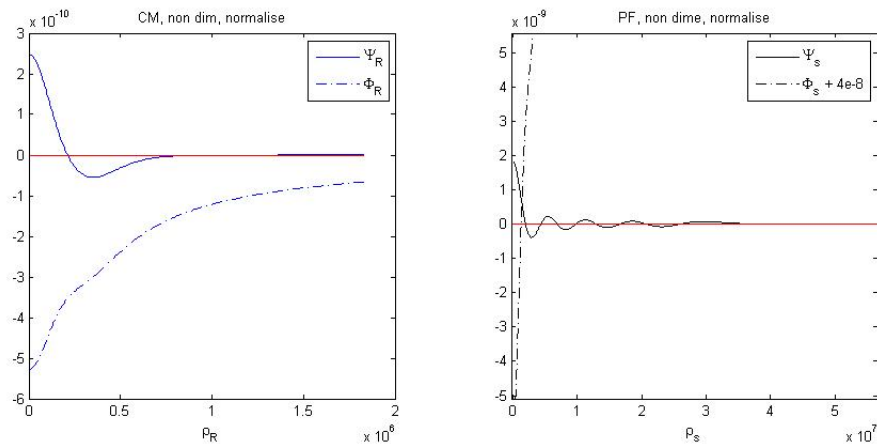


FIGURE 6.14 – Cas où $l = 100$ et où $n_R = 1$. On peut y voir la solution $n_s = 8$ pour la particule fictive. Les fonctions ont été normalisées, mais pas dimensionnées.

Les énergies sont représentées à la figure 6.15, à comparer avec la figure 6.9. Les valeurs de nos énergies sont :

n_s	E_s normée	E_R normée	E normée
0	-0.251989707706657e-8	-0.181596808433564e-8	-0.433586516140221e-8
1	-0.092198560583196e-8	-0.093671627703116e-8	-0.185870188286312e-8
2	-0.055015880619854e-8	-0.063777561994307e-8	-0.118793442614161e-8
3	-0.038834506283413e-8	-0.048638410645541e-8	-0.087472916928954e-8
4	-0.029858658972530e-8	-0.039445530047463e-8	-0.069304189019994e-8
5	-0.024178636381954e-8	-0.033250342029895e-8	-0.057428978411849e-8
6	-0.020272292075561e-8	-0.028781859201851e-8	-0.049054151277412e-8
7	-0.017426770104974e-8	-0.025401158629728e-8	-0.042827928734702e-8
8	-0.015264777197581e-8	-0.022750923234047e-8	-0.038015700431628e-8

A nouveau, on remarque qu'augmenter le rapport des masses rapproche les énergies E_s et E_R dans le cas $n_s = n_R$. Cette observation reste vraie quelque soit n_R , comme l'illustre la figure 6.16 que l'on peut comparer avec 6.10.

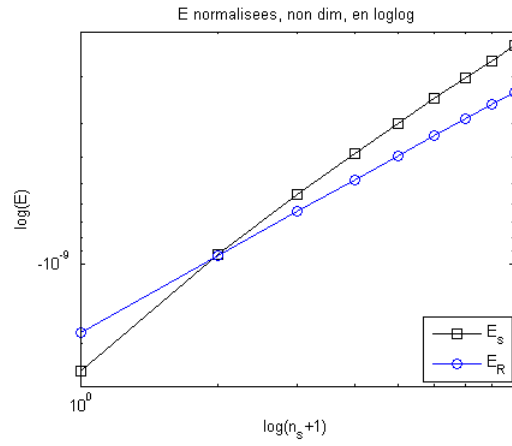


FIGURE 6.15 – Cas où $l = 100$ et où $n_R = 1$. Représentation des énergies normalisées.

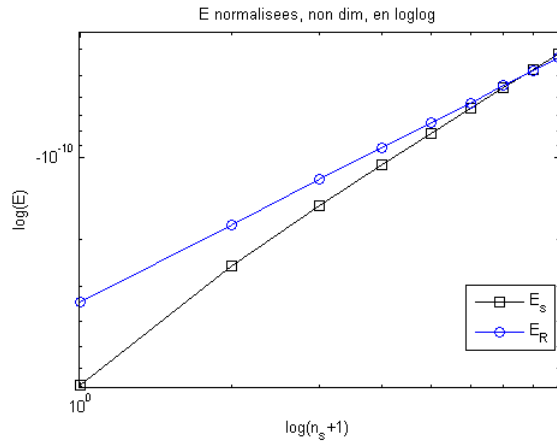


FIGURE 6.16 – Cas où $l = 100$ et où $n_R = 7$. Représentation des énergies normalisées.

Finalement, reprenons nos énergies totales pour ces études sur $l = 100$. Nous représentons à la figure 6.17 les énergies totales pour les différents n_s et pour ces trois cas n_R considérés : $n_R = 0, 1$ et 7 . Comme précédemment, on se rend compte que l'état de plus basse énergie est l'état fondamental $n_s = 0 = n_R$.

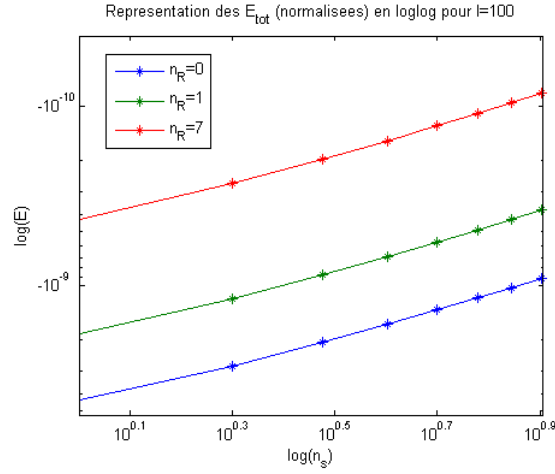


FIGURE 6.17 – Cas où $l = 100$. Représentation des énergies totales normalisées.

Redimensionnement

On utilise le redimensionnement (A.4) pour remettre des unités sur nos variables. Prenons par exemple deux particules, l'une ayant la masse d'un proton et l'autre d'un électron. La figure 6.18 représente l'état dimensionné tel que $n_R = 1$ et $n_s = 2$. Il est intéressant de noter l'échelle des axes. Les énergies dimensionnées associées à un tel état sont de l'ordre de 10^{-95} [Joule].

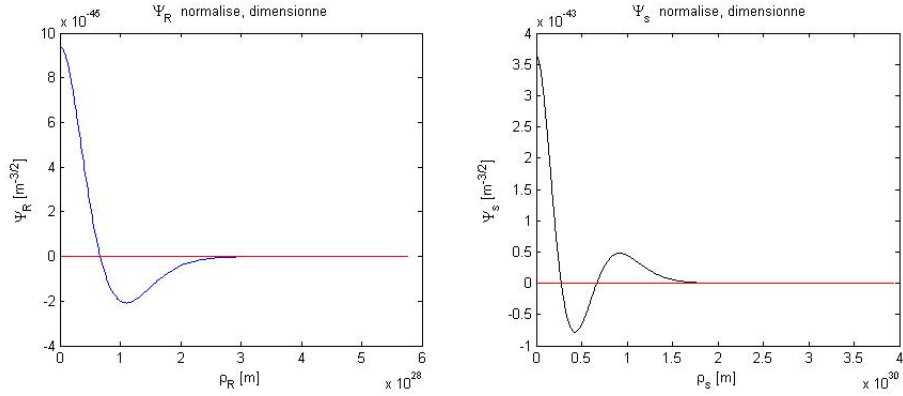


FIGURE 6.18 – Solutions Ψ_R^* et Ψ_s^* dimensionnées pour un proton et un électron. ($n_R = 1$ et $n_s = 2$)

Nous pouvons alors nous pencher sur le calcul des probabilités associées à nos solutions. La densité de probabilité pour le centre de masse est $||\Psi_s^*||^2(\Psi_R^*)^2$. En effet, puisque nous parlons de probabilité, il faut que l'intégrale des densité de probabilité soit de valeur unité :

$$\int ||\Psi_s^*||^2(\Psi_R^*)^2 dR = ||\Psi_s^*||^2 ||\Psi_R^*||^2 = 1$$

De même, la densité de probabilité pour la particule fictive est $||\Psi_R^*||^2(\Psi_s^*)^2$. La figure 6.19 nous montre ces densités dans le cas de particules de la masse d'un proton et d'un électron.

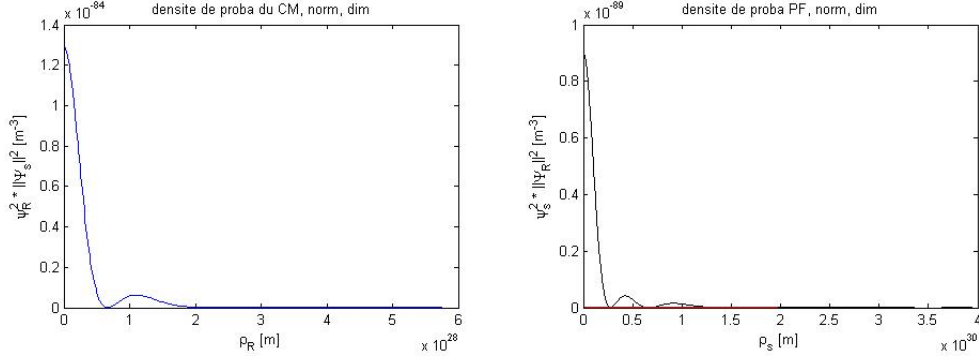


FIGURE 6.19 – Densité de probabilité dimensionnées pour un proton et un électron. ($n_R = 1$ et $n_s = 2$)

Nous n'avons pas effectué d'analyse de stabilité de nos solutions, mais il est fort probable que la solution dont l'énergie est la plus basse soit la plus stable. On s'attend donc à ce que l'état fondamental $n_R = 0 = n_s$ soit l'état le plus stable. Cet état fondamental, pour des particules macroscopiques du moins, nous prédit que les particules seront collapsées l'une sur l'autre. En effet, le maximum de probabilité se situe pour $s = 0$, c'est-à-dire pour une distance inter-particules nulle. Ceci n'est à vrai dire pas étonnant ; en effet, la seule interaction considérée entre ces particules est l'action gravitationnelle générée par l'équation de Poisson.

A la figure 6.20 nous avons représenté ces probabilités pour le cas collapsé ($n_s = 0 = n_R$) de deux masses de $0.5 \cdot 10^{-18} [kg]$. La masse totale d'un tel système est donc de $10^{-18} [kg]$. Rappelons-nous que, dans le cas à une particule, un système de $10^{-18} [kg]$ nous donnait un paquet d'onde étalé sur un rayon d'environ un millimètre (voir figure 5.17, page 53). Dans le cas à deux particules, les interactions internes au système étalent le paquet d'onde du centre de masse jusque 5 millimètres. Autrement dit, si l'on considère notre système comme une seule particule, son centre de masse sera mieux localisé. Alors que, si on étudie le système composé de deux particules, le pic de probabilité pour le centre de masse sera plus étalé.

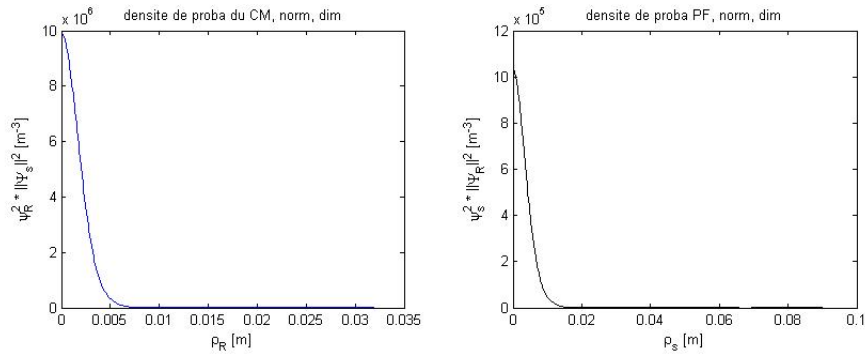


FIGURE 6.20 – Densités de probabilité pour deux masses de $0.5 \cdot 10^{-18} [kg]$ (Solutions $n_R = 0$ et $n_s = 0$). Les énergies associées sont $E_R = -3.1095 \cdot 10^{-45} [Joule]$, $E_s = -2.2309 \cdot 10^{-45} [Joule]$

6.2 Décomposition selon les particules

Dans la première partie de cette étude à deux particules, nous avons considéré une certaine expression des équations de Schrödinger-Newton. Cette formulation est une proposition originale pour ce mémoire et n'a jamais été étudiée auparavant. Dans cette section, nous nous pencherons sur une autre expression des équations, discutée par Adler, Diosi et Van Meter ([15, 17]).

Diosi propose une expression intégrale des équations de Schrödinger-Newton multi-particules. Pour une seule particule, ces équations nous mènent à l'expression de Schrödinger-Newton (4.5) que nous connaissons. Dans le cas de plusieurs particules par contre, nous utiliserons l'approximation d'Hartree-Fock pour dériver nos équations. Ces dernières présentent des différences par rapport au système que nous avons étudié dans la section ci-dessus. De plus, ces équations selon Diosi n'ont jamais été étudiée numériquement. Nous allons donc nous y atteler.

L'approximation d'Hartree-Fock est une hypothèse d'indépendance des fonctions d'onde qui est généralement utilisée pour des particules identiques. De fait, nous allons vite nous rendre compte que la recherche numérique de solutions stationnaires est ardue si l'on s'obstine à considérer des masses différentes. Nous nous contenterons donc d'étudier le cas de deux masses égales dans ce mémoire. Dans ce cas, nous retrouvons des équations similaires aux équations de Schrödinger-Newton pour une particule. Nous tenterons également de comparer cette expression selon Diosi avec la décomposition selon le centre de masse étudiée ci-dessus. Mais avant toute chose, introduisons la formulation de Diosi pour les équations de Schrödinger-Newton.

Expression des équations

Considérons un système de N particules de masse m_1, \dots, m_N repérés par les vecteurs r_1, \dots, r_N . La fonction d'état s'écrit $\Psi(X, t)$, où $X = (r_1, r_2, \dots, r_N)$, et le système obéira à un potentiel unique $\Phi(X, t)$. Diosi écrit les équations de Schrödinger-Newton de la manière suivante ([15, 17]) :

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(X, t) = \left(-\sum_{k=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_k} \nabla_{r_k}^2 + \sum_{k,l=1}^N W_{kl}(r_k - r_l) + \sum_{k=1}^N m_k \Phi(r_k, t) \right) \psi(X, t) \\ \nabla_r^2 \Phi(r, t) = 4\pi G \int |\Psi(X', t)|^2 \sum_{k=1}^N m_k \delta_{r-r_k} d^{3N} X \end{cases} \quad (6.7)$$

où les énergies potentielles W_{kl} sont des interactions non gravitationnelles, que nous ne considérerons pas dans ce mémoire, et les δ_{r-r_k} sont des distributions de Dirac..

Pour une particule, ce système d'équations mènent aux équations de Schrödinger-Newton que nous connaissons (voir section 5). Voyons ce qu'il en est pour deux particules.

[HYPOTHÈSE : ANSATZ D'HARTREE] Supposons que l'on peut décomposer l'état en

$$\Psi(r_1, r_2, t) = \Psi_1(r_1, t) \Psi_2(r_2, t)$$

où chaque fonction d'état $\Psi_{1/2}$ est normalisée. Les équations (6.7) deviennent alors

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi_1(r_1, t) \Psi_2(r_2, t)) \\ = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_{r_1}^2 + m_1 \Phi(r_1, t) - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_{r_2}^2 + m_2 \Phi(r_2, t) \right) \Psi_1(r_1, t) \Psi_2(r_2, t) \\ \nabla_r^2 \Phi(r, t) = 4\pi G I \end{cases} \quad (6.8)$$

L'expression intégrale I mérite quelques éclaircissements :

$$\begin{aligned}
I &= \int \int |\Psi_1(r_1, t)|^2 |\Psi_2(r_2, t)|^2 (m_1 \delta_{r-r_1} + m_2 \delta_{r-r_2}) dr_1 dr_2 \\
&= m_1 \int |\Psi_1(r_1, t)|^2 \delta_{r-r_1} \left[\int |\Psi_2(r_2, t)|^2 dr_2 \right] dr_1 \\
&\quad + m_2 \int |\Psi_2(r_2, t)|^2 \delta_{r-r_2} \left[\int |\Psi_1(r_1, t)|^2 dr_1 \right] dr_2 \\
&= m_1 \int |\Psi_1(r_1, t)|^2 \delta_{r-r_1} dr_1 + m_2 \int |\Psi_2(r_2, t)|^2 \delta_{r-r_2} dr_2 \\
&= m_1 |\Psi_1(r, t)|^2 + m_2 |\Psi_2(r, t)|^2
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé l'hypothèse de normalité sur les fonctions d'état $\Psi_{1/2}$. Finalement, il est possible de séparer la première équation de (6.8) pour obtenir

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1(r_1, t) + \frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_{r_1}^2 \Psi_1(r_1, t) - m_1 \Phi(r_1, t) \Psi_1(r_1, t) = \Lambda \Psi_1(r_1, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_2(r_2, t) + \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_{r_2}^2 \Psi_2(r_2, t) - m_2 \Phi(r_2, t) \Psi_2(r_2, t) = -\Lambda \Psi_2(r_2, t) \\ \nabla_r^2 \Phi(r, t) = 4\pi G(m_1 |\Psi_1(r, t)|^2 + m_2 |\Psi_2(r, t)|^2) \end{cases} \quad (6.9)$$

On se rend compte que cette expression diffère significativement de celle que nous connaissons (voir (6.6)). A présent nous considérons les deux particules indépendamment, soumises à un potentiel commun qu'elles engendrent de concert.

Résultats

Comme précédemment, nous réécrivons les équations de Schrödinger-Newton stationnaires en ajoutant des étoiles aux grandeurs dimensionnées. Nous abandonnons également la distinction entre r_1 et r_2 puisqu'elle n'intervient plus dans les équations.

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_{r^*}^2 \Psi_1^* + m_1 \Phi^* \Psi_1^* = E_1^* \Psi_1^* \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_{r^*}^2 \Psi_2^* + m_2 \Phi^* \Psi_2^* = E_2^* \Psi_2^* \\ \nabla_{r^*}^2 \Phi^* = 4\pi G(m_1 |\Psi_1^*|^2 + m_2 |\Psi_2^*|^2) \end{cases} \quad (6.10)$$

La somme des énergies E_1^* et E_2^* nous donnera alors l'énergie totale E^* .

Pour résoudre numériquement ces équations, nous devons tout d'abord retirer les dimensions, puis passer en symétrie sphérique. Ces calculs seront également similaires à ceux effectués précédemment et nous les avons repris dans l'annexe B, page 99. Nous pouvons alors chercher les solutions stationnaires. Mais avant, rappelons les hypothèses utilisées dans cette annexe :

- [HYPOTHÈSE] Les fonctions d'états Ψ_1 et Ψ_2 sont supposées réelles.
- [HYPOTHÈSE] Pour le caractère lisse des fonctions, on impose $\Psi'_{1/2}(0) = \Phi'(0) = \phi'_s(0) = 0$.

La recherche de solutions s'avère plus complexe avec ce système d'équations. Mais lorsque les deux masses sont égales, les équations se simplifient aisément. En effet, comme les équations sont symétriques on aura $\Psi_1 = \Psi_2$ et $E_1 = E_2$; les équations (6.10) deviennent alors

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r^*}^2 \Psi_1^* + m \Phi^* \Psi_1^* = E_1^* \Psi_1^* \\ \nabla_{r^*}^2 \Phi^* = 4\pi G(2m |\Psi_1^*|^2) \end{cases}$$

Cette expression est très proche des équations de Schrödinger-Newton pour une particule et nous pouvons facilement trouver ses solutions stationnaires, ce qui sera fait dans la suite.

Par contre, si nous voulons chercher des solutions pour le cas plus général de deux masses quelconques nous nous heurtons à une difficulté. Dans les cas précédents, les conditions initiales des fonctions Ψ et Φ devaient être fixées pour trouver des solutions convergentes. Mais il était toujours possible de fixer une condition initiale pour lancer une recherche sur l'autre condition initiale. Dans la section précédente, nous pouvions choisir l'état stationnaire pour l'état du centre de masse avant de chercher les états stationnaires pour la particule fictive. Si l'on tente d'appliquer cette méthode à nos équations, nous rencontrons un problème. En effet, les deux états Ψ_1 et Ψ_2 sont liés au moyen du potentiel Φ . Le moindre changement sur la condition initiale d'une des fonctions aura un impact sur la forme de l'autre. De plus, les solutions Ψ_1 et Ψ_2 doivent être toutes les deux normalisées. Pour rechercher les solutions, il faudrait considérer une méthode de « shooting » pour étudier où se situent les fameux états stationnaires. Nous laissons cela à de prochaines études.

Nous avons donc lancé l'intégration pour rechercher la solution fondamentale, dans le cas de deux masses égales de $0.5 \cdot 10^{-18} [kg]$. Avec les résultats obtenus, nous pouvons comparer nos deux décompositions pour Schrödinger-Newton.

A la figure 6.21, nous avons représenté les états Ψ_1^* et Ψ_2^* , normalisés et dimensionnés. Comme nous l'avons signalé, les fonctions Ψ_1 et Ψ_2 seront égales, de même que leurs énergies. Et puisque les équations dans le cas de masses égales ressemblent à Schrödinger-Newton pour une particule, nous savons qu'il existera une infinité de solutions stationnaires. L'état fondamental portera de nouveau l'énergie la plus faible. La figure 6.22 nous présentent les états Ψ_s^* et Ψ_R^* , normalisés et dimensionnés, provenant de la décomposition selon le centre de masse de la section précédente.

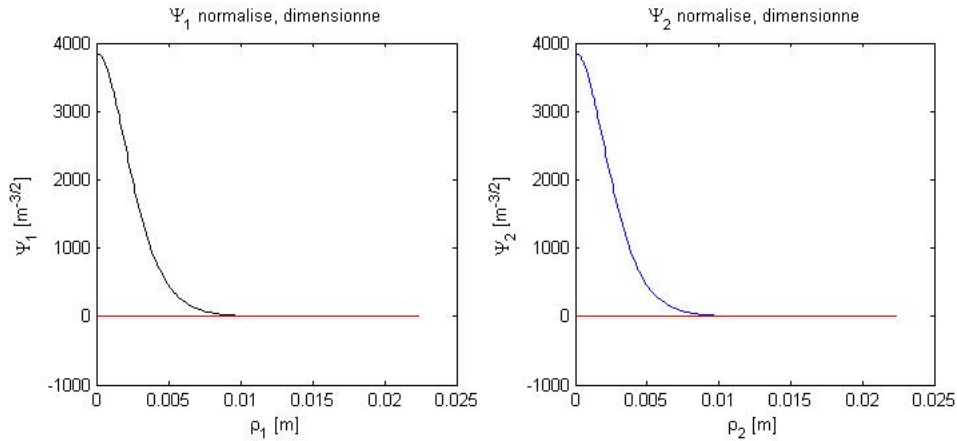


FIGURE 6.21 – Solution fondamentale, dimensionnée et normalisée, pour la décomposition selon les particules. Les énergies associées sont $E_{1/2} = -8.1491 \cdot 10^{-45} [Joule]$.

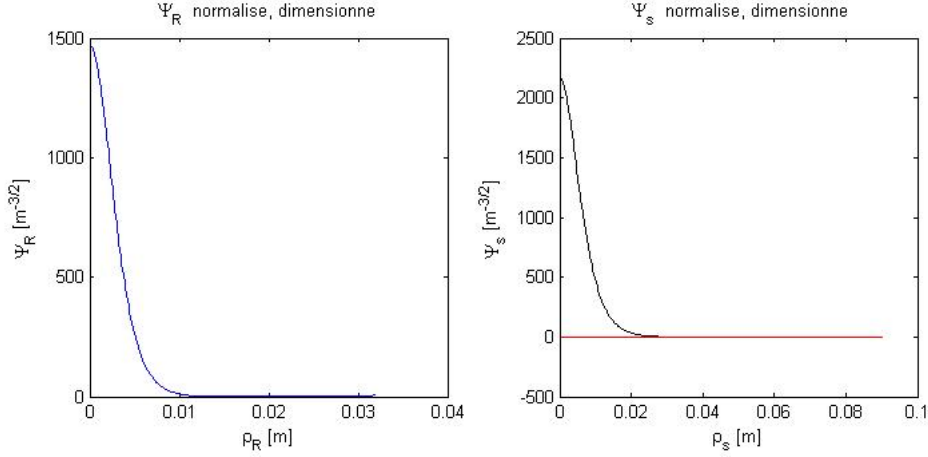


FIGURE 6.22 – Solution fondamentale, dimensionnée et normalisée, pour la décomposition selon le centre de masse. Les énergies associées sont $E_R = -3.1095 \cdot 10^{-45} [\text{Joule}]$, $E_s = -2.2309 \cdot 10^{-45} [\text{Joule}]$

Comme nous le voyons, il n'est pas aisé de comparer ces graphes car nous ne sommes pas dans le même système de variable. On comprend également que l'hypothèse de symétrie ne s'applique pas aux mêmes origines. Dans le référentiel du centre de masse, nous considérons une symétrie sphérique autour du centre de masse et autour de la particule fictive.

Néanmoins, essayons-nous à la comparaison des méthodes. La seule solution, c'est de représenter l'état total Ψ^* , selon les variables ρ_1^* et ρ_2^* . Pour la décomposition selon les particules, il suffit de multiplier les deux vecteurs Ψ_1^* et Ψ_2^* . Pour la décomposition selon le centre de masse par contre, nous devons d'abord multiplier Ψ_s^* et Ψ_R^* pour obtenir l'état total $\Psi^*(\rho_s^*, \rho_R^*)$. Ensuite, il suffit de le représenter dans les coordonnées (ρ_1^*, ρ_2^*) grâce au changement de variable (6.1). C'est ce qui est fait aux graphes 6.23 et 6.24.

On se rend compte que la décomposition selon les particules nous donne un résultat qui est plus localisé : la fonction Ψ^* est plus raide. De plus, l'énergie totale associée à cette décomposition est plus faible :

- $E^* = -1.6298 \cdot 10^{-44} [\text{Joule}]$ pour la décomposition selon les particules,
- $E^* = -5.3404 \cdot 10^{-45} [\text{Joule}]$ pour la décomposition selon le centre de masse.

On constate que, si les ordres de grandeurs et la forme de cette solution sont similaires, leurs différences ne sont pas négligeables. Il n'est pas évident de choisir entre ces deux méthodes sur cette simple comparaison. Il faudra sans doute une étude expérimentale pour définitivement trancher la question.

En attendant, on peut se rappeler que, pour une particule de masse $10^{-18} [kg]$, nous avons trouvé une énergie de $-6.5047 \cdot 10^{-44} [\text{Joule}]$. Si l'on garde l'hypothèse, toujours vérifiée jusqu'à présent, qu'une énergie plus faible nous donne des pics plus centrés pour la densité de probabilité, nous pouvons tirer quelques conclusions.

Nous sommes donc en présence de deux particules de masses $0.5 \cdot 10^{-18} [kg]$ chacune. Lorsque ce système est considéré comme un tout, nous obtenons une particule principalement localisée, comme nous l'avons vu, dans un rayon d'un millimètre. Lorsque nous considérons nos deux particules séparées, nous trouvons des prédictions différentes selon la décomposition envisagée.

- La décomposition selon le centre de masse nous prédit un pic moins localisé. Nous avons vu que le centre de masse se situait à présent dans un rayon de 5 millimètres. Et cette solution est associée à une énergie plus élevée.

- La décomposition selon les particules est associée à un énergie plus faible. Nous pouvons supposer, selon les résultats précédents, que cette décomposition nous donnera un centre de masse plus localisé. Ce qui signifierait que les deux particules interagissent de manière à accélérer la décohérence. Cette hypothèse est tentante et mériterait d'être étudiée plus avant.

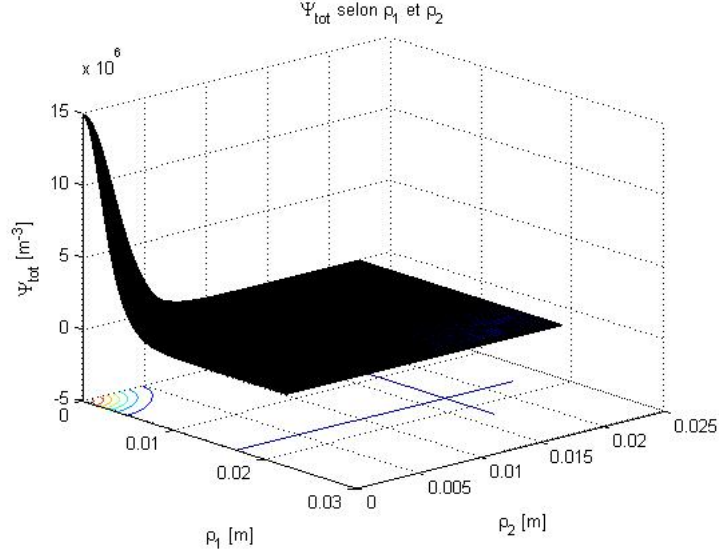


FIGURE 6.23 – Représentation de l'état total Ψ^* . Solution fondamentale, dimensionnée et normalisée, pour la décomposition selon les particules.

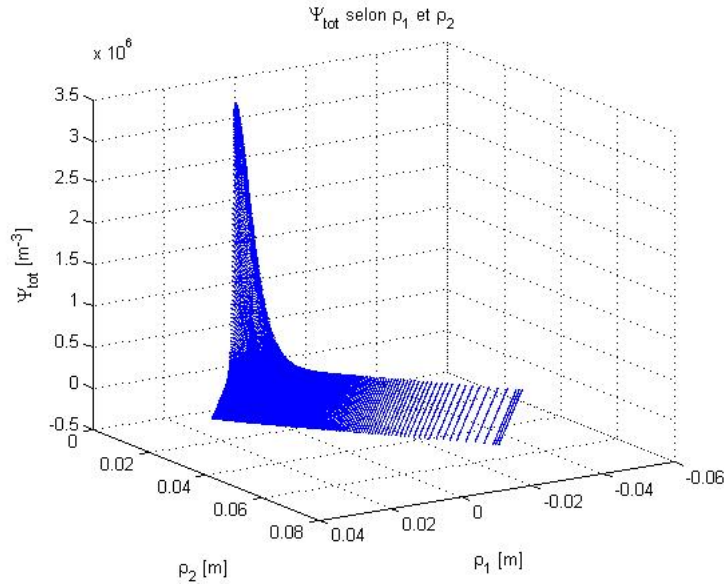


FIGURE 6.24 – Représentation de l'état total Ψ^* . Solution fondamentale, dimensionnée et normalisée, pour la décomposition selon le centre de masse.

Chapitre 7

Ajout de moment cinétique

Toutes les études précédentes se placent dans le cadre de la symétrie sphérique. Dans ce chapitre, nous allons étudier le cadre plus général où aucune hypothèse de ce type n'est appliquée. Dans ce cas, le laplacien de l'équation de Schrödinger se décompose en une partie traduisant la cinétique radiale, celle que nous avons déjà étudiée, et en une partie pour la cinétique de rotation. Cette cinétique de rotation va nous intéresser. En effet, si nous parvenons à étudier ces équations de Schrödinger-Newton pour deux particules en rotation l'une autour de l'autre, nous pourrions considérer des systèmes de l'ordre Terre-Lune et vérifier si les ordres de grandeurs trouvés correspondent aux observations.

C'est avec de tels objectifs que cette étude fut entreprise. Nous avons donc commencé par le cas à une particule. Malheureusement, l'étude numérique pour une particule s'avère déjà d'une complexité paralysante, comme nous allons le voir. Une telle étude semble requérir une autre approche numérique pour rechercher des solutions.

Mais avant de se décourager, voyons comment nous avons exprimé nos équations de Schrödinger-Newton.

7.1 Pour l'équation de Schrödinger

En mécanique quantique, il n'est pas rare de considérer l'équation de Schrödinger dans le cas général, c'est-à-dire avec moment cinétique ([16]). L'état est alors exprimé dans la base des harmoniques sphériques. Nous avons résumé ci-dessous les principaux développements de cette approche.

Reprenons donc l'équation de Schrödinger pour une particule indépendante du temps (voir (4.3), page 33) dans un potentiel central :

$$E\Psi(r) = H\Psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r) + U(\rho)\Psi(r)$$

Avant de décomposer le laplacien, nous devons passer en coordonnées sphériques :

$$\begin{cases} x &= \rho \sin \theta \cos \varphi \\ y &= \rho \sin \theta \sin \varphi \\ z &= \rho \cos \theta \end{cases}$$

L'équation de Schrödinger devient alors ¹ :

$$E\Psi(\rho, \theta, \varphi) = \left(\frac{p_{rad}^2}{2m} + \frac{l^2}{2m\rho^2} + U(\rho) \right) \Psi(\rho, \theta, \varphi) \quad (7.1)$$

– où $\frac{p_{rad}^2}{2m}$ est l'énergie cinétique radiale, avec $p_{rad}^2 \bullet = -\hbar^2 \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} (\rho \bullet)$

1. Cette équation est équivalente à l'équation de Schrödinger si l'opérateur p_{rad} est hermitien, c'est-à-dire si l'on se restreint à des fonctions de carré intégrable : $\lim_{\rho \rightarrow 0} \rho \Psi(\rho, \theta, \varphi) = 0$.

– et où $\frac{\mathbf{l}^2}{2m\rho^2}$ est l'énergie cinétique de rotation, avec $\mathbf{l}^2 \bullet = \frac{-\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \bullet) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \bullet \right)$

Or, nous connaissons les fonctions propres du moment angulaire \mathbf{l} , et de sa composante \mathbf{l}_z selon z ; ce sont les fameuses harmoniques sphériques² :

$$\begin{aligned} \mathbf{l}^2 Y_k^n(\theta, \varphi) &= k(k+1) \hbar^2 Y_k^n(\theta, \varphi) \\ \mathbf{l}_z Y_k^n(\theta, \varphi) &= n \hbar Y_k^n(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Les harmoniques sphériques s'expriment

$$Y_k^n(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2k+1)(k-|n|)!}{4\pi(k+|n|)!}} P_{k,|n|}(\cos \theta) e^{in\varphi} \quad \begin{aligned} k &= 0, 1, 2, \dots, \infty \\ n &= -k, -k+1, \dots, +k \end{aligned}$$

et forment un ensemble orthonormal complet :

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_k^n(\theta, \varphi) \overline{Y_{\mathbf{k}}^n(\theta, \varphi)} \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{n,\mathbf{n}} \delta_{k,\mathbf{k}} \quad (7.2)$$

Tout état $\Psi(\rho, \theta, \varphi)$ peut donc se décomposer sur la base de ces harmoniques :

$$\Psi(\rho, \theta, \varphi) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=-k}^k \Psi_k^n(\rho, \theta, \varphi) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=-k}^k \chi_k(\rho) Y_k^n(\theta, \varphi) \quad (7.3)$$

La norme de Ψ devra donc se calculer de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \|\Psi(\rho, \theta, \varphi)\|^2 &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \Psi \overline{\Psi} \rho^2 \sin \theta d\theta d\varphi d\rho \\ &= \sum_{k,\mathbf{k},n,\mathbf{n}} \int_0^\infty \chi_k \overline{\chi_{\mathbf{k}}} \left(\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_k^n \overline{Y_{\mathbf{k}}^n} \sin \theta d\theta d\varphi \right) \rho^2 d\rho \\ &\stackrel{(7.2)}{=} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=-k}^k \int_0^\infty \chi_k \overline{\chi_k} \rho^2 d\rho = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=-k}^k \|\chi_k\|^2 \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (2k+1) \|\chi_k\|^2 \end{aligned}$$

Nous allons chercher ces fonctions Ψ_k^n qui sont fonctions propres de \mathbf{l}^2 , \mathbf{l}_z (et également de H). En insérant l'expression de Ψ dans l'équation de Schrödinger (7.1), on peut séparer l'équation suivant les différents modes :

$$E \chi_k(\rho) = \left(\frac{p_{rad}^2}{2m} + \frac{k(k+1)\hbar^2}{2m\rho^2} + U(\rho) \right) \chi_k(\rho) \quad k = 0, 1, 2, \dots, \infty$$

Cette décomposition est due à la linéarité de l'équation de Schrödinger. Nous verrons qu'il en va différemment pour nos équations de Schrödinger-Newton.

7.2 Pour les équations de Schrödinger-Newton

Rappelons les équations de Schrödinger-Newton pour une particule (voir (4.5), page 38) que nous écrivons pour le cas stationnaire :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(r) + U(r) \Psi(r) = E \Psi(r) \\ \nabla^2 U(r) = 4\pi G m^2 |\Psi(r)|^2 \end{cases}$$

2. Ces harmoniques s'écrivent habituellement Y_l^m . Dans ce mémoire, nous les noterons Y_k^n pour ne pas confondre les indices l , m avec le moment angulaire \mathbf{l} et la masse m .

Passons en coordonnées sphériques et décomposons notre état sur la base des harmoniques sphériques (7.3) :

$$\Psi(\rho, \theta, \varphi) = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=-k}^k \chi_k(\rho) Y_k^n(\theta, \varphi)$$

Les équations de Schrödinger-Newton deviennent alors :

$$\begin{cases} \sum_{k,n} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} (\rho \chi_k(\rho)) + \frac{k(k+1)\hbar^2}{2m\rho^2} \chi_k(\rho) + U(\rho, \theta, \varphi) \chi_k(\rho) \right) Y_k^n(\theta, \varphi) = E \sum_{k,n} \chi_k(\rho) Y_k^n(\theta, \varphi) \\ \nabla^2 U(\rho, \theta, \varphi) = 4\pi G m^2 \left| \sum_{k,n} \chi_k(\rho) Y_k^n(\theta, \varphi) \right|^2 \end{cases}$$

L'équation de Poisson ne peut pas rester sous cette forme. Pour la simplifier, nous allons passer par l'expression intégrale du potentiel U . En effet, les fonctions de Green nous permettent de réécrire l'équation de Poisson comme :

$$\begin{aligned} \nabla^2 U(r) = 4\pi g(r) &\Leftrightarrow U(r) = - \int \frac{g(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 \mathbf{r}' \\ &\Leftrightarrow U(\rho, \theta, \varphi) = - \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi g(\tau, \vartheta, \omega) \frac{(\tau)^2 \sin \vartheta}{|\rho - \tau|} d\vartheta d\omega d\tau \end{aligned} \quad (7.4)$$

Dans notre cas, la fonction g est liée au module de Ψ , et cette expression (7.4) devient :

$$\begin{aligned} U(\rho, \theta, \varphi) &= -Gm^2 \int \int \int \left| \sum_{k,n} \chi_k(\tau) Y_k^n(\vartheta, \omega) \right|^2 \frac{(\tau)^2 \sin \vartheta}{|\rho - \tau|} d\vartheta d\omega d\tau \\ &= -Gm^2 \int \int \int \left(\sum_{k,n} \chi_k(\tau) Y_k^n(\vartheta, \omega) \right) \left(\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{n}} \overline{\chi_{\mathbf{k}}(\tau) Y_{\mathbf{k}}^{\mathbf{n}}(\vartheta, \omega)} \right) \frac{(\tau)^2 \sin \vartheta}{|\rho - \tau|} d\vartheta d\omega d\tau \\ &= -Gm^2 \sum_{k,n,\mathbf{k},\mathbf{n}} \int \frac{(\tau)^2}{|\rho - \tau|} \chi_k(\tau) \overline{\chi_{\mathbf{k}}(\tau)} \left(\int \int Y_k^n(\vartheta, \omega) \overline{Y_{\mathbf{k}}^{\mathbf{n}}(\vartheta, \omega)} \sin \vartheta d\vartheta d\omega \right) d\tau \end{aligned}$$

Grâce à la relation (7.2) sur les harmoniques sphériques, cette expression se simplifie :

$$\begin{aligned} U(\rho, \theta, \varphi) &= -Gm^2 \sum_{k,n,\mathbf{k},\mathbf{n}} \int_0^\infty \frac{(\tau)^2}{|\rho - \tau|} \chi_k(\tau) \overline{\chi_{\mathbf{k}}(\tau)} \delta_{n,\mathbf{n}} \delta_{k,\mathbf{k}} d\tau \\ &= -Gm^2 \sum_k \sum_{n=-k}^k \int_0^\infty |\chi_k(\tau)|^2 \frac{(\tau)^2}{|\rho - \tau|} d\tau \\ &= -Gm^2 \sum_k (2k+1) \int_0^\infty |\chi_k(\tau)|^2 \frac{(\tau)^2}{|\rho - \tau|} d\tau \end{aligned}$$

Ce qui signifie que le potentiel U est un potentiel central, dépendant uniquement de ρ . Grâce aux relations (7.4) pour la symétrie sphérique, nous trouvons l'équation de Poisson suivante :

$$\nabla^2 U(\rho) = 4\pi G m^2 \sum_{k=0}^{\infty} (2k+1) |\chi_k(\rho)|^2$$

Puisque le potentiel ne dépend que du rayon ρ , nous pouvons séparer nos équations de Schrödinger. Le systèmes d'équations de Schrödinger-Newton s'écrit finalement :

$$\boxed{\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m\rho} (\rho \chi_k(\rho))'' + \frac{k(k+1)\hbar^2}{2m\rho^2} \chi_k(\rho) + U(\rho) \chi_k(\rho) = E \chi_k(\rho), & k \in \mathbb{N} \\ \frac{1}{\rho} (\rho U(\rho))'' = 4\pi G m^2 \sum_{q=0}^{\infty} (2q+1) |\chi_q(\rho)|^2 \end{cases}} \quad (7.5)$$

où, les laplaciens ne s'appliquant que sur la variable ρ , nous les avons remplacés par :

$$\nabla^2 \bullet = \frac{1}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} (\rho \bullet) = \frac{1}{\rho} (\rho \bullet)''$$

Jusqu'à présent, nous n'avions étudié les équations de Schrödinger-Newton qu'en symétrie sphérique, ce qui correspond à $k = 0$, avec un potentiel dépendant uniquement de $\chi_{k=0}$. Ici, nous n'avons plus cette hypothèse de la symétrie sphérique et l'on se rend compte que le potentiel doit en réalité dépendre de toutes les phases $\chi_k, k = 0, 1, \dots, \infty$.

[HYPOTHÈSE] Le potentiel ne peut pas être numériquement calculé à cause de cette sommation infinie. Nous allons tronquer cette série à l'ordre k . On postule donc que, à l'ordre k , les fonctions d'onde $\chi_q, q > k$ sont négligeables. Le potentiel qui agit sur χ_k ne dépendra donc pas des ordres supérieurs à k . Selon cette approximation, les équations de Schrödinger-Newton peuvent se réécrire :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m\rho}(\rho\chi_k)'' + \frac{k(k+1)\hbar^2}{2m\rho^2}\chi_k + U_k\chi_k = E\chi_k, & k \in \mathbb{N} \\ \frac{1}{\rho}(\rho U_k)'' = 4\pi Gm^2 \sum_{q=0}^k (2q+1)|\chi_q|^2 \end{cases} \quad (7.6)$$

Les potentiels U_k peuvent alors se décomposer en potentiels plus simples \tilde{U}_q ; et nous permettent de ré-exprimer les équations :

$$\boxed{\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m\rho}(\rho\chi_k)'' + \frac{k(k+1)\hbar^2}{2m\rho^2}\chi_k + U_k\chi_k = E\chi_k, & k \in \mathbb{N} \\ U_k = \sum_{q=0}^k \tilde{U}_q \\ \frac{1}{\rho}(\rho \tilde{U}_q)'' = 4\pi Gm^2(2q+1)|\chi_q|^2 \end{cases}} \quad (7.7)$$

Et nous pouvons résoudre les ordres successivement :

$$\begin{aligned} - \quad k = 0 : & \quad \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m\rho}(\rho\chi_0)'' + \tilde{U}_0\chi_0 = E\chi_0 \\ \frac{1}{\rho}(\rho \tilde{U}_0)'' = 4\pi Gm^2|\chi_0|^2 \end{cases} \\ - \quad k = 1 : & \quad \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m\rho}(\rho\chi_1)'' + \left(\frac{\hbar^2}{m\rho^2} + \tilde{U}_0 + \tilde{U}_1\right)\chi_1 = E\chi_1 \\ \frac{1}{\rho}(\rho \tilde{U}_1)'' = 12\pi Gm^2|\chi_1|^2 \end{cases} \\ - \quad k = 2 : & \quad \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m\rho}(\rho\chi_2)'' + \left(\frac{3\hbar^2}{m\rho^2} + \tilde{U}_0 + \tilde{U}_1 + \tilde{U}_2\right)\chi_2 = E\chi_2 \\ \frac{1}{\rho}(\rho \tilde{U}_2)'' = 20\pi Gm^2|\chi_2|^2 \end{cases} \\ - \quad \text{Etc.} & \end{aligned}$$

Ceci ressemble quelque peu à la décomposition selon le centre de masse, où nous considérons le potentiel sur la particule fictive comme une somme de deux potentiels. Dans la suite, nous allons nous concentrer sur les trois premiers ordres, $k = 0, 1, 2$.

Enlever les unités

Reprenons nos équations (7.7) et ré-exprimons les énergies potentielles en fonction de leurs potentiels : $U_k = m\Phi_k$ et $\tilde{U}_p = m\phi_p$. Comme auparavant, nous ajoutons des étoiles pour indiquer que les variables portent des dimensions et nous obtenons le système suivant :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m\rho^*}(\rho^*\chi_k^*)'' + \frac{k(k+1)\hbar^2}{2m(\rho^*)^2}\chi_k^* + m\Phi_k^*\chi_k^* = E^*\chi_k^*, & k \in \mathbb{N} \\ \Phi_k^* = \sum_{p=0}^k \phi_p^* \\ \frac{1}{\rho^*}(\rho^*\phi_p^*)'' = 4(2p+1)\pi Gm|\chi_p^*|^2 \end{cases}$$

Encore une fois, ce système possède une invariance d'échelle :

$$\begin{aligned} (\chi_k^*, \Phi_k^*, \phi_p^*, E^*) &\rightarrow \sigma^2 (\chi_k^*, \Phi_k^*, \phi_p^*, E^*) \\ (\rho^*) &\rightarrow \sigma^{-1} (\rho^*) \\ \|\chi_k^*\|^2 &\rightarrow \sigma \|\chi_k^*\|^2 \text{ où } \sigma \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (7.8)$$

Ces relations nous seront utiles pour la normalisation des solutions.

Nous voulons maintenant retirer les unités de notre système pour obtenir l'expression suivante :

$$\boxed{\begin{cases} \frac{1}{\rho}(\rho\chi_k)'' = -\left(E - \frac{k(k+1)}{\rho^2} - \Phi_k\right)\chi_k, & k \in \mathbb{N} \\ \Phi_k = \sum_{p=0}^k \phi_p \\ \frac{1}{\rho}(\rho\phi_p)'' = (2p+1)|\chi_p|^2 \end{cases}} \quad (7.9)$$

Le redimensionnement suivant permet d'obtenir ce résultat tout en conservant la norme des fonctions χ_k :

$$\begin{cases} \rho = \delta\rho^* & \text{avec } \delta = \frac{8\pi Gm^3}{\hbar^2} \left[\frac{1}{\mathbf{m}} \right] \\ \chi_k = \alpha\chi_k^* & \text{avec } \alpha = \sqrt{\frac{1}{\delta^3}} \left[\sqrt{\mathbf{m}^3} \right] \\ \Phi_k = \beta\Phi_k^* & \text{avec } \beta = \frac{1}{4\pi Gm\delta} \left[\frac{s^2}{\mathbf{m}^2} \right] \\ \phi_p = \beta\phi_p^* \\ E = \epsilon E^* & \text{avec } \epsilon = \frac{\beta}{m} \left[\frac{s^2}{kg \mathbf{m}^2} \right] \end{cases} \quad (7.10)$$

[HYPOTHÈSE] Par facilité, nous considérerons que les fonctions χ_k sont réelles. Nous pouvons alors commencer à étudier les différents ordres successivement.

Pour l'ordre k=0 :

Pour $k = 0$, les équations de Schrödinger-Newton s'écrivent Et nous pouvons résoudre les ordres successivement :

$$\begin{cases} (\rho\chi_0)'' = -(E - \phi_0)\rho\chi_0 \\ (\rho\phi_0)'' = \rho|\chi_0|^2 \end{cases}$$

Nous retrouvons donc les équations de Schrödinger-Newton stationnaires pour une particule, en symétrie sphérique. La méthode a déjà été longuement étudiée dans ce travail ; il suffit de poser :

$$\begin{cases} S_0 &= \chi_0 \\ V_0 &= E - \phi_0 \end{cases}$$

et de résoudre les équations bien connues :

$$\begin{cases} (\rho S_0)'' = -\rho V_0 S_0, & k \in \mathbb{N} \\ (\rho V_0)'' = -\rho S_0^2 \end{cases}$$

Rappelons ci-dessous quelques résultats connus. Nous avons développé en (5.10) l'expression intégrale de la fonction d'état et du potentiel :

$$\begin{cases} S_0(\rho) = S_0(0) - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) S_0(\tau) V_0(\tau) d\tau \\ V_0(\rho) = V_0(0) - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) S_0^2(\tau) d\tau \end{cases}$$

A partir de ces expressions intégrales, nous savons que V_0 peut être développé en la série suivante (voir (5.11)) :

$$V_0(\rho) = A_0 + \frac{B_0}{\rho} + o\left(\frac{1}{\rho^2}\right)$$

où $A_0 = V_0(0) - \int_0^\infty \tau S_0^2(\tau) d\tau, \quad B_0 = \int_0^\infty \tau^2 S_0^2(\tau) d\tau$

Ceci est possible car la fonction S_0 est une solution stationnaire choisie pour être de norme finie. Ainsi, l'énergie peut se calculer en utilisant $E = V_0(\infty) = A_0$; et cette valeur devra alors être normalisée.

De même nous connaissons l'expansion autour de 0 (voir (5.13)) :

$$\begin{cases} S_0(\rho) = S_0(0) - \frac{\rho^2}{6} S_0(0) V_0(0) + \frac{\rho^4}{120} S_0(0) (S_0(0)^2 + V_0(0)^2) + \dots \\ V_0(\rho) = V_0(0) - \frac{\rho^2}{6} S_0(0)^2 + \frac{\rho^4}{60} V_0(0) S_0(0)^2 + \dots \end{cases} \quad (7.11)$$

Pour l'intégration numérique et la recherche de solutions, les dérivées premières V_0' et S_0' sont posées nulles en l'origine car nous sommes en symétrie sphérique, et le coefficient $V_0(0)$ est fixé à 1. Nous pouvons le fixer sans perdre de généralité car le système sera ultérieurement normalisé et cette valeur sera automatiquement ajustée. Et la condition initiale S_0 peut prendre différentes valeurs selon la solution voulue :

n_0	S_0
0	1.088636938710230
1	0.826474523774667
2	0.744213788867689
3	0.700145360057018
4	0.671400593053027
5	0.650614610639635
6	0.634599531870136
7	0.621719214727512
8	0.611034493745437
9	0.601961711588648

où les valeurs ci-dessus ne sont ni normalisées ni dimensionnées. Finalement, la résolution numérique nous fournira V_0 et l'énergie totale E (non normalisées ni dimensionnées) qui seront réinjectés dans les ordres supérieurs.

Pour les ordres supérieurs :

Reprenons le système (7.9) :

$$\begin{cases} \frac{1}{\rho} (\rho \chi_k)'' = - \left(E - \frac{k(k+1)}{\rho^2} - \sum_{p=0}^k \phi_p \right) \chi_k, & k \in \mathbb{N}_0 \\ \frac{1}{\rho} (\rho \phi_p)'' = (2p+1) |\chi_p|^2 \end{cases}$$

et effectuons le changement de variable suivant :

$$\begin{cases} S_k &= \chi_k \\ V_k &= -\phi_k \end{cases}$$

Les équations de Schrödinger-Newton deviennent alors :

$$\begin{cases} (\rho S_k)'' = -\rho \left(\sum_{p=0}^k V_p - \frac{k(k+1)}{\rho^2} \right) S_k, & k \in \mathbb{N} \\ (\rho V_k)'' = -(2k+1)\rho S_k^2 \end{cases} \quad (7.12)$$

A l'ordre k , l'expression $\sum_{p=0}^{k-1} V_p$ est connue par les résultats antérieurs.

Pour mener à bien l'étude numérique, nous avons besoin des expressions intégrales de V_k et S_k ainsi que d'une expansion autour de $\rho = 0$. L'expression intégrale se trouve aisément en intégrant les équations :

$$\begin{cases} S_k(\rho) &= S_k(0) - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho^2} \right) S_k(\tau) \left(\sum_{p=0}^k V_p(\tau) - \frac{k(k+1)}{\tau^2} \right) d\tau \\ V_k(\rho) &= V_k(0) - (2k+1) \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho^2} \right) S_k^2(\tau) d\tau \end{cases}$$

A partir de ces expressions intégrales, V_k peut être développé en la série suivante :

$$V_k(\rho) = A_k + \frac{B_k}{\rho} + o\left(\frac{1}{\rho^2}\right) \quad (7.13)$$

$$\text{où} \quad A_k = V_k(0) - (2k+1) \int_0^\infty \tau S_k^2(\tau) d\tau, \quad B_k = (2k+1) \int_0^\infty \tau^2 S_k^2(\tau) d\tau$$

Cette expansion est possible car la fonction S_k est une solution stationnaire choisie pour être de norme finie. Ainsi donc $A_k = V_k(\infty)$. Or le potentiel ϕ_k doit s'annuler en l'infini : $\phi_k \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} 0$. Nous devons donc rechercher des solutions stationnaires telles que $A_k = V_k(\infty)$.

En ce qui concerne l'expansion de S_k et V_k autour de 0, il y aura quelques changements par rapport à ce qui fut fait précédemment. Voyons tout d'abord la forme que nous voulons imposer à notre χ_k ([16]). L'équation homogène associée à l'équation de Schrödinger est :

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{k(k+1)}{\rho^2} \right) u(\rho) = 0$$

où la fonction $u(\rho) = \rho \chi_k(\rho)$. Supposons que ses solutions sont de la forme $u(\rho) = \rho^s + a_1 \rho^{s+1} + a_2 \rho^{s+2} + a_3 \rho^{s+3} + \dots$, où $s \in \mathbb{Z}$ et en remplaçant cette expression dans l'équation, on trouve que l'exposant s doit valoir soit $(k+1)$, soit $-k$. Ainsi $\rho S_k(\rho)$ aura la même expression que $u(\rho)$:

$$\rho S_k(\rho) = \rho^s + a_1 \rho^{s+1} + a_2 \rho^{s+2} + a_3 \rho^{s+3} + \dots$$

Puisque cette solution S_k doit être normalisable, nous rejetons le cas $s = -k$ et nous allons rechercher des solutions de la forme

$$S_k(\rho) = a_0 \rho^k + a_1 \rho^{k+1} + a_2 \rho^{k+2} + a_3 \rho^{k+3} + \dots \quad (7.14)$$

En remplaçant S_k dans l'équation de Poisson,

$$(\rho V_k)'' = -(2k+1)\rho S_k^2$$

nous pouvons déduire l'expansion pour V_k .

$$V_k(\rho) = \frac{d_0}{\rho} + d_1 + d_2 \rho^{2k+2} + d_3 \rho^{2k+3} + \dots \quad (7.15)$$

Ces expansions seront évaluées autour de l'origine ; nous pouvons donc les tronquer à l'ordre $o(\rho^5)$. Pour déterminer les coefficients, il ne restera plus qu'à injecter ces expressions dans nos équations (7.12). Pour ce faire, il est préférable de considérer chaque k séparément.

Pour l'ordre $k=1$:

Nous devons résoudre les équations de Schrödinger-Newton :

$$\begin{cases} (\rho S_1)'' = -\rho(V_0 + V_1 - \frac{2}{\rho^2})S_1 \\ (\rho V_1)'' = -3\rho S_1^2 \end{cases} \quad (7.16)$$

Selon (7.14) et (7.15), il nous faut chercher des expansions pour S_1 et V_1 de la forme :

$$\begin{aligned} S_1(\rho) &= a_0\rho + a_1\rho^2 + a_2\rho^3 + a_3\rho^4 + \dots \\ V_1(\rho) &= \frac{d_0}{\rho} + d_1 + d_2\rho^4 + \dots \end{aligned} \quad (7.17)$$

Quant à V_0 , nous connaissons son expansion autour de 0 grâce à (7.11). En remplaçant toutes ces fonctions dans (7.16), nous trouvons les conditions suivantes sur les coefficients :

$$\begin{aligned} a_0 &\quad \text{au choix} \\ a_1 &= -\frac{d_0}{a_0} \\ a_2 &= \frac{1}{10}((f_0 - d_1)a_0 - d_0a_1) \\ a_3 &= \frac{1}{18}((f_0 - d_1)a_1 - d_0a_2) \\ d_0 &\quad \text{au choix} \\ d_1 &\quad \text{au choix} \\ d_2 &= -\frac{3}{20}a_0^2 \end{aligned}$$

Les choix de a_0 , d_0 et d_1 dépendront les conditions frontières que nous voulons imposer en l'origine. A l'ordre $k=0$, nous posons $S'_0(0) = V'_0(0) = 0$, car c'était cohérent avec la symétrie sphérique. Mais à l'ordre $k=1$, l'état χ_1 devra être associé aux premières harmoniques Y_1^{-1} , Y_1^0 , Y_1^1 . Si l'on souhaite que l'état S_1 soit continu en l'origine, il faut donc impérativement que $S_1(0) = 0$, ce qui est bien vérifié par la forme de notre expansion. Nous avons donc trois degrés de liberté; trois conditions initiales à fixer.

[HYPOTHÈSE] Pour simplifier la recherche de solutions, nous allons nous restreindre à deux conditions initiales libres en imposant que V_1 soit lisse à l'origine : c'est-à-dire que $d_0 = 0$. Dans ce cas, les coefficients deviennent :

$$\begin{aligned} a_1 &= 0 \\ a_2 &= \frac{(f_0 - d_1)}{10}a_0 \\ a_3 &= 0 \\ d_2 &= -\frac{3}{20}a_0^2 \end{aligned}$$

avec a_0 et d_1 qu'il reste à fixer. C'est lors de la recherche de solutions normalisables que ces paramètres libres seront déterminés. En effet, nous voulons des solutions telles que $S_1(\infty) = 0$, pour la normalité, et telles que $V_1(\infty) = 0$, pour que le potentiel tende vers 0 en l'infini.

La résolution numérique nous fournira finalement χ_1 et ϕ_1 , dont ce dernier sera réinjecté dans les ordres supérieurs.

Pour l'ordre $k=2$:

Effectuons encore cet exercice pour l'ordre $k = 2$. Les équations de Schrödinger-Newton à résoudre sont :

$$\begin{cases} (\rho S_2)'' = -\rho(V_2 - \frac{6}{\rho^2} - \phi_0 - \phi_1)S_2 \\ (\rho V_2)'' = -5\rho S_2^2 \end{cases} \quad (7.18)$$

On cherche des expansions en série autour de 0 de la forme :

$$\begin{aligned} S_2(\rho) &= b_0\rho^2 + b_1\rho^3 + b_2\rho^4 + \dots \\ V_2(\rho) &= \frac{e_0}{\rho} + e_1 + \dots \end{aligned}$$

En remplaçant toutes nos expansions (voir (7.11) et (7.17)) dans les équations de Schrödinger-Newton (7.18), on trouve les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} b_0 &\quad \text{au choix} \\ b_1 &= -\frac{(e_0 + d_0)b_0}{6} \\ b_2 &= -\frac{(f_0 + d_1 + e_1)b_0 + (e_0 + d_0)b_1}{12} \\ e_0 &\quad \text{au choix} \\ e_1 &\quad \text{au choix} \end{aligned}$$

A nouveau, nous voulons que l'état soit lisse en l'origine, et les conditions à imposer sont liées aux harmoniques Y_2^n . Nous devons imposer que $S_2(0) = 0$, ce qui est déjà vérifié.

[HYPOTHÈSE] Nous nous retrouvons donc avec trois conditions initiales. Pour simplifier l'étude numérique, nous allons nous restreindre au cas d'un potentiel lisse en l'origine : $e_0 = 0$. Ceci signifie que le potentiel sera constant proche de l'origine. Dans ce cas, les coefficients deviennent :

$$\begin{aligned} b_1 &= -\frac{d_0 b_0}{6} \\ b_2 &= -\frac{(f_0 + d_1 + e_1)b_0 + d_0 b_1}{12} \end{aligned}$$

avec b_0 et e_1 dont les valeurs restent à fixer. Elles seront déterminés lors de la recherche de solutions normalisables ; en effet, nous cherchons des solutions telles que $S_2(\infty) = 0$ et $V_2(\infty) = 0$.

Pour les ordres $k>2$:

On se rend compte qu'il est possible de continuer ceci pour les ordres supérieurs. Néanmoins, il arrivera un certain ordre où nos expansions deviendront constantes puisqu'elles sont tronquées à l'ordre $o(\rho^4)$.

Considérons le potentiel V_k ; auquel on retire à chaque fois le terme en $1/\rho$ pour que la fonction se comporte bien en l'origine. Son comportement va rapidement devenir constant lorsque k augmente :

$$V_k(\rho) = d_1 + d_2\rho^{2(k+1)} + d_3\rho^{2(k+1)+1} + \dots \xrightarrow{k \geq 2} V_k(\rho) = d_1 + o(\rho^5)$$

C'est déjà ce qu'on observe à l'ordre $k = 2$.

Pour S_k , on arrivera également à une constante, mais seulement pour des ordres $k > 4$. En effet :

$$S_k(\rho) = a_0\rho^k + a_1\rho^{k+1} + a_2\rho^{k+2} + a_3\rho^{k+3} + \dots \xrightarrow{k \geq 5} S_k(\rho) = 0 + o(\rho^5)$$

A ce stade, nous obtenons des conditions proches de l'origine $S_k = 0$, ce qui signifie que l'intégration numérique nous rendra une solution $S_k(\rho) = 0, \forall \rho$.

Autrement dit, nous pouvons négliger les solutions d'ordre supérieur à $k = 4$.

7.3 Etude numérique

Nous avons plusieurs étapes à prendre en compte pour étudier nos solutions. Tous d'abord, nous allons chercher des solutions stationnaires $\Psi_k^n = \chi_k Y_k^n$ pour les différents ordres. A ce stade, nos solutions ne seront ni normalisées, ni dimensionnées. Ensuite, il faut nous rappeler que ces solutions ne sont pas des états à part entière. L'état Ψ est la superposition des différents Ψ_k^n . C'est seulement lorsque les solutions Ψ_k^n sont connues que l'on peut considérer les solutions pour Ψ . A ce stade, on peut normaliser Ψ et chercher quelle solution est associée à l'énergie minimale. Mais, comme nous allons le voir, la recherche de solutions s'avère plus compliquée à cause de notre condition $V_k(\infty) = 0$.

Pour l'ordre $k=0$:

Nous avons déjà étudié le cas de la symétrie sphérique. Nous savons donc qu'il existe une infinité de solutions, associées à des énergies et des normes différentes, selon la condition initiale $S_0(0)$ choisie.

n_0	V_0	S_0	E	$ \chi_0 ^2$
0	1	1.088636938710230	-1.065735599380511	45.4744528451563
1	1	0.826474523774667	-0.757273936503723	88.1282849243212
2	1	0.744213788867689	-0.663979007721656	129.3939635928237
3	1	0.700145360057018	-0.614725118382967	169.6380182697226
4	1	0.671400593053027	-0.582875275998030	209.1426983797185
5	1	0.650614610639635	-0.559998214570672	248.0872518454415
6	1	0.634599531870136	-0.542460244678836	286.5825628833778
7	1	0.621719214727512	-0.528414837304990	324.7067609473937
8	1	0.611034493745437	-0.516807730173598	362.5173049738151
9	1	0.601961711588648	-0.506985484377812	400.0580991701651

A la figure 7.1, nous avons repris la solution χ_0 pour $n_0 = 0$. On y montre également le potentiel ϕ_0 et son approximation $\frac{-3.5(n_0 + 1)}{\rho}$. Ainsi, quand nous réinjecterons ce potentiel dans les ordres supérieurs, nous aurons une approximation de ce potentiel en dehors de l'intervalle d'intégration $[0, 35]$.

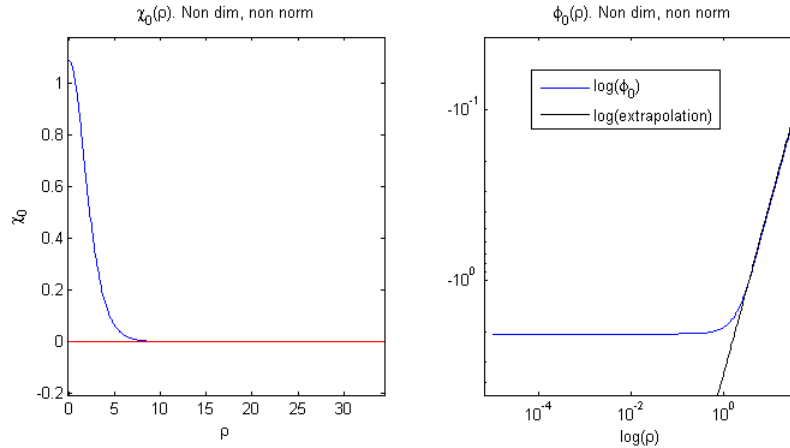


FIGURE 7.1 – L'image de gauche représente $\chi_0(\rho)$, tandis que l'image de droite nous montre $\phi_0(\rho)$ et son approximation en $1/\rho$.

Les deux figures suivantes nous présente cette solution associée à son harmonique, c'est-à-dire $\Psi_0^0(\rho, \theta, \varphi) = \chi_0(\rho)Y_0^0(\theta, \varphi)$. Nous avons fixé la variable θ à $\pi/2$, ce qui correspond en coordonnées cartésiennes à une hauteur $z = 0$. La fonction Ψ_0^0 est donc représentée à la figure 7.2 selon ses variables ρ et φ . Nous sommes ensuite passé en coordonnées cartésiennes pour représenter Ψ_0^0 selon x et y à la figure 7.3. Répétons encore que ces fonctions ne sont, à ce stade, ni normalisées, ni dimensionnées.

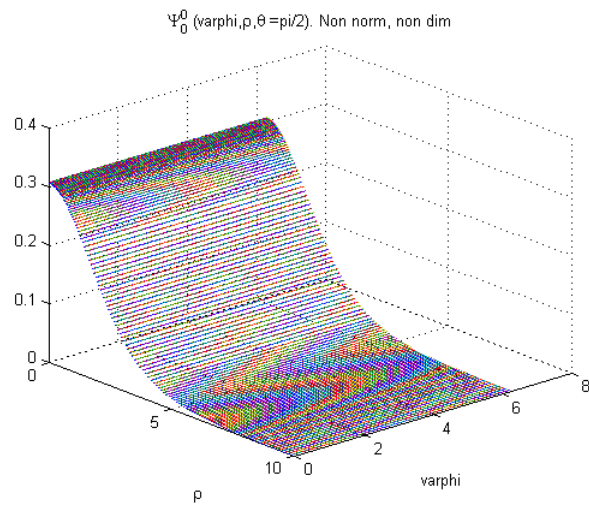


FIGURE 7.2 – Représentations de la solution $n_0 = 0$ pour Ψ_0^0 en coordonnées sphériques. La variable θ est fixée à $\pi/2$.

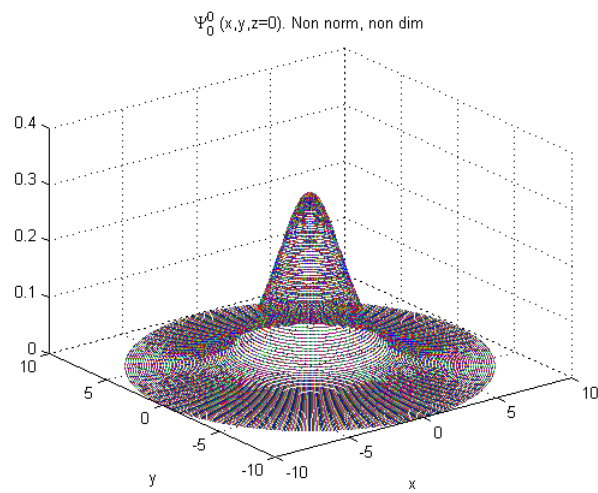


FIGURE 7.3 – Représentations de la solution $n_0 = 0$ pour Ψ_0^0 en coordonnées cartésiennes. La variable z est fixée à 0.

Pour l'ordre $k=1$:

Nous réinjectons le potentiel ϕ_0 et l'énergie E pour la solution $n_0 = 0$ dans les équations de Schrödinger-Newton pour $k = 1$. Puisque nous avons fixé $d_0 = 0$, l'étude numérique dépend ici de deux conditions initiales, $a_0 = S'_1(0)$ et $d_1 = V_1(0)$. Fixons tout d'abord le paramètre d_1 à une valeur quelconque et cherchons une solution stationnaire. Par exemple, si $a_0 = 1$, on peut trouver une valeur de d_1 telle que S_1 converge. Le résultat est présenté à la figure 7.4. Nous pouvons y constater que V_1 ne converge pas vers 0 pour ce jeu de paramètres. En effet, si l'on calcule sa valeur à l'infini (voir (7.13)),

$$V_1(\infty) = A_1 = V_1(0) - 3 \int_0^\infty \tau S_1^2(\tau) d\tau$$

on trouve que V_1 converge vers 2.819.

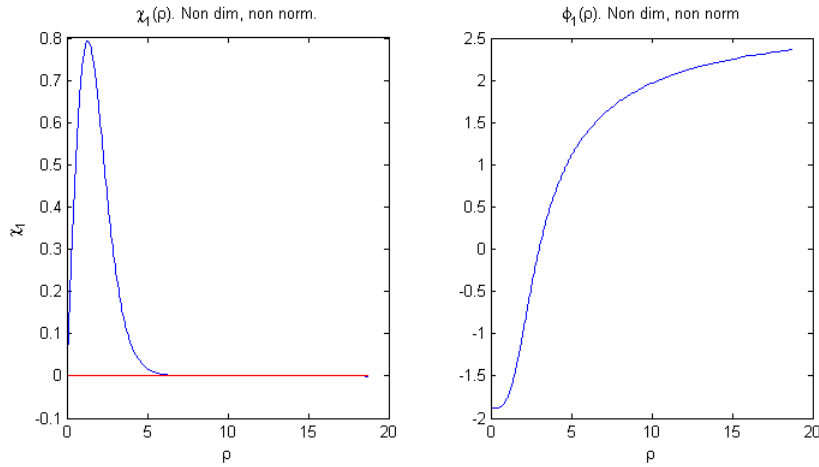


FIGURE 7.4 – Intégration numérique pour $k = 1$ quand $a_0 = 1$ et $d_1 = 1.884231258683528$. L'image de gauche nous montre que χ_1 tend bien vers 0 à l'infini. L'image de droite nous montre que ϕ_1 tend vers 2.819 à l'infini, au lieu de tendre vers 0.

Ainsi donc, le paramètre $a_0 = 1$ devra être adapté de manière à trouver une solution telle que V_1 tende vers 0. Pour ce faire, nous avons utilisé une méthode de « shooting », c'est-à-dire que nous avons testé plusieurs valeurs pour a_0 et que nous avons choisi celle qui minimisait A_1 . On trouve alors que si a_0 vaut entre 0.1643187 et 0.1643192, A_1 est de l'ordre de 10^{-5} . Il est difficile d'être plus précis pour a_0 car les erreurs numériques commencent à apparaître et rendent la minimisation sur A_1 impossible. Ces erreurs numériques proviennent sans doute de la manière de fixer d_1 pour que S_1 converge vers 0. Il faudrait revoir la méthode de minimisation (c'est-à-dire la *méthode intuitive*) pour la rendre plus stable face à cette recherche. Quoiqu'il en soit, fixons pour le moment a_0 à 0.164319 et étudions les solutions obtenues. Il est possible de trouver une valeur de d_1 telle que S_1 converge. Cette solution est représentée à la figure 7.5 et nous donne les valeurs suivantes :

n_1	a_0	d_0	d_1	A_1	$\ \chi_1\ ^2$
0	0.164319	0	0.593746458885238	3.421510^{-5}	0.560174936755828

Nous voulons maintenant étudier les fonctions Ψ_1^n , $n = -1, 0, 1$. Comme l'harmonique sphérique Y_1^1 est complexe, notre solution Ψ_1^1 sera également complexe. La figure 7.6 nous montre Ψ_1^1 en coordonnées sphériques quand θ est fixé à $\pi/2$. Pour plus de clarté, les isocourbes de ces mêmes graphes sont reprises à la figure 7.7. Enfin, la fonction Ψ_1^1 est représentées en coordonnées cartésiennes, avec $z = 0$, à la figure 7.8.

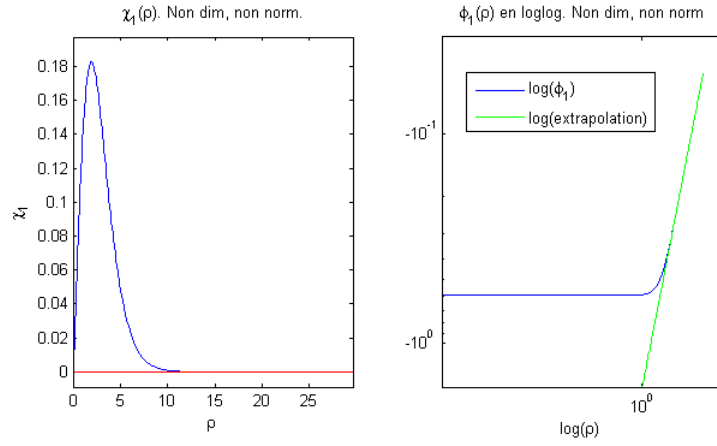


FIGURE 7.5 – Intégration numérique pour $k = 1$ quand $a_0 = 0.164319$ et $d_1 = 0.593746458885238$. L'image de gauche nous montre que χ_1 tend bien vers 0 à l'infini. L'image de droite nous montre ϕ_1 ainsi qu'une approximation de ce potentiel trouvée grâce à une interpolation linéaire. Le potentiel ϕ_1 tend bien vers 0 car $A_1 = 3.4215 \cdot 10^{-5}$.

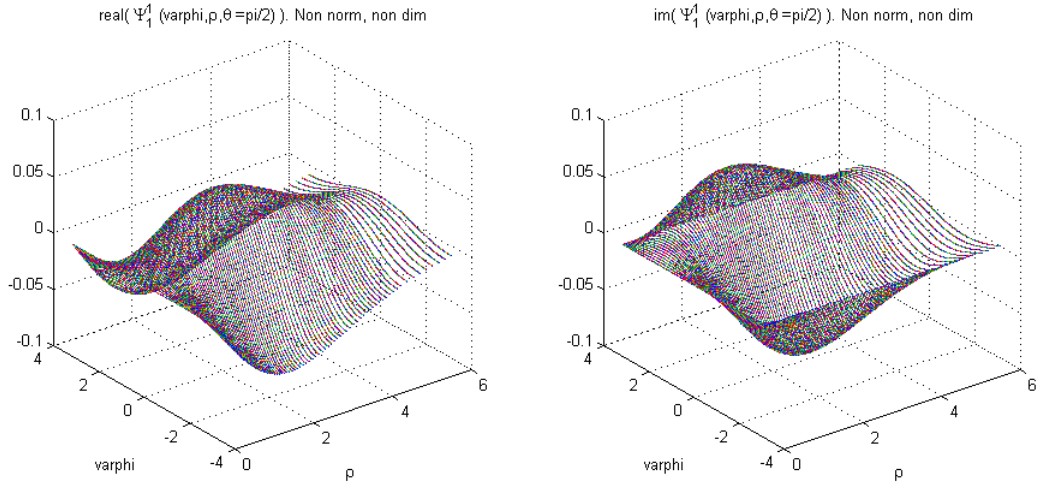


FIGURE 7.6 – Représentation de la solution $n_0 = 1$ (et $n_0 = 0$) pour Ψ_1^1 en coordonnées sphériques. La variable θ est fixée à $\pi/2$. L'image de gauche nous montre la partie réelle de Ψ_1^1 et l'image de droite sa partie complexe.

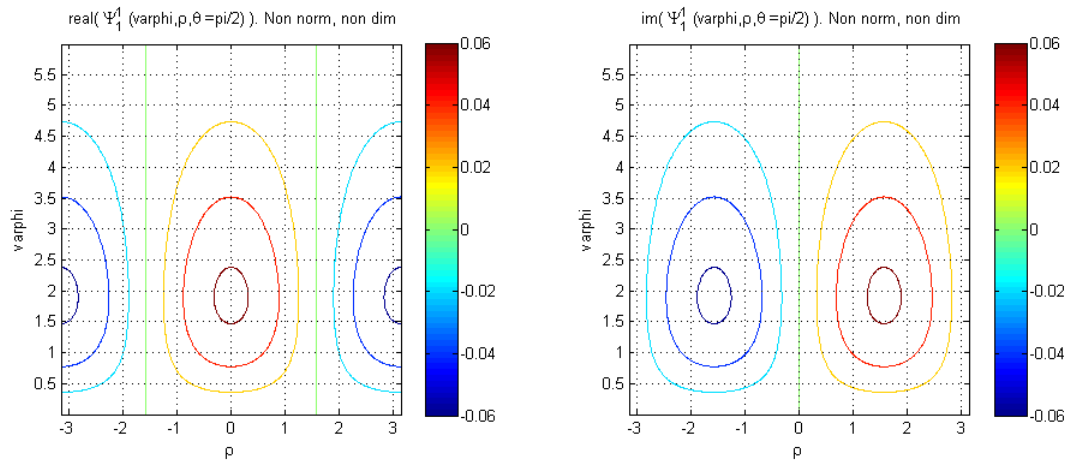


FIGURE 7.7 – Isocourbes de la solution $n_0 = 1$ (et $n_0 = 0$) pour Ψ_1^1 en coordonnées sphériques. La variable θ est fixée à $\pi/2$. L'image de gauche nous montre la partie réelle de Ψ_1^1 et l'image de droite sa partie complexe.

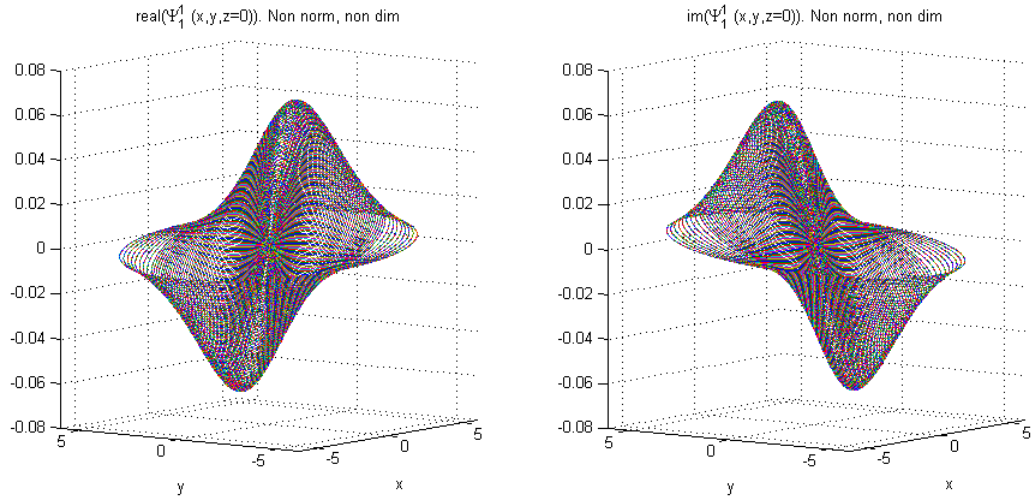


FIGURE 7.8 – Représentation de la solution $n_0 = 1$ (et $n_0 = 0$) pour Ψ_1^1 en coordonnées cartésiennes. La variable z est fixée à 0. L'image de gauche nous montre la partie réelle de Ψ_1^1 et l'image de droite sa partie complexe.

Il n'est pas nécessaire de représenter Ψ_1^{-1} car $Y_1^{-1} = -\overline{Y_1^1}$. La fonction Ψ_1^{-1} aura donc la même partie complexe que Ψ_1^1 , tandis que sa partie réelle de Ψ_1^{-1} sera l'opposée de celle de Ψ_1^1 . La dernière harmonique à considérer est donc Y_1^0 . A nouveau, nous représentons cette fonction en coordonnées cartésiennes à la figure 7.9 puis en coordonnées sphériques à la figure 7.10.

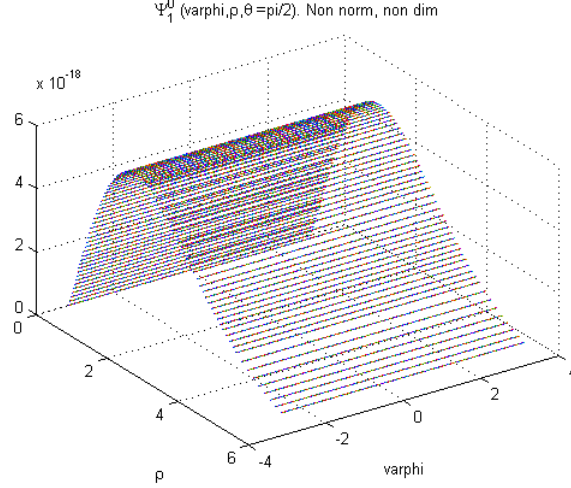


FIGURE 7.9 – Représentation de la solution $n_0 = 1$ (et $n_0 = 0$) pour Ψ_1^0 en coordonnées sphériques. La variable θ est fixée à $\pi/2$.

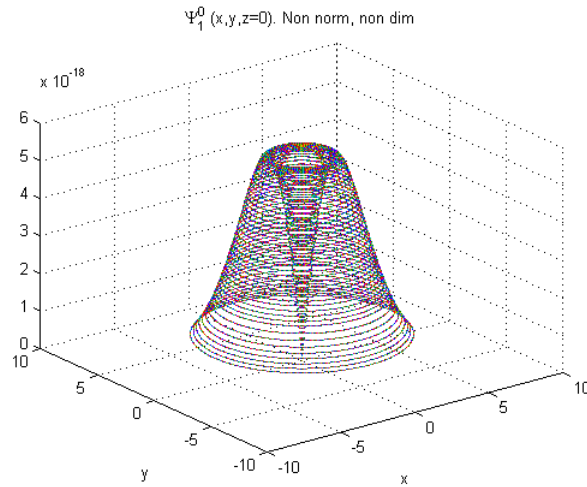


FIGURE 7.10 – Représentation de la solution $n_0 = 1$ (et $n_0 = 0$) pour Ψ_1^0 en coordonnées cartésiennes. La variable z est fixée à 0.

On peut constater que la solution $\Psi_1^0(x, y, z)$ n'est pas lisse en l'origine. Cela vient de notre condition sur $V_1'(0)$: nous avons laissé ce coefficient libre au lieu de le fixer à zéro. Nous pourrions changer nos hypothèses en fixant a_0 à 0 et en relaxant la condition sur d_0 . Mais on se rend compte qu'imposer $a_0 = 0$ revient à annuler tous les coefficients. L'intégration numérique ne nous rendra alors qu'une solution nulle. Il est donc impératif de conserver ce coefficient a_0 non nul.

On pourrait encore chercher des solutions lorsque les trois paramètres a_0 , d_0 et d_1 sont libres. Mais, outre le fait que cette recherche va s'avérer compliquée en raison du nombre de degré de liberté, nous

aurons alors un problème de convergence. En effet, pour le moment, nous vérifions la convergence de V_1 vers 0 grâce au calcul de A_1 :

$$V_1(\infty) = A_1 = V_1(0) - 3 \int_0^\infty \tau S_1^2(\tau) d\tau$$

Or si V_1 possède une partie en $1/\rho$, ce qui est le cas quand d_0 est non nul, il est impossible de calculer $V_1(0)$. La seule solution pour savoir si V_1 convergera vers 0 dans ce cas, c'est d'approximer V_1 sur la fin de son intervalle. Nous savons que cette fonction se comportera en $1/\rho$ quand S_1 est nul. En approximant V_1 par une fonction $b + a/\rho$, via une interpolation linéaire, nous pourrions déterminer si V_1 tend vers 0 en étudiant la valeur de b . Les résultats rendus par cette méthode sont cohérents avec A_1 , du moins jusqu'à une précision de 10^{-4} . Quand on se souvient que notre critère A_1 est sensible aux erreurs numériques à partir de 10^{-5} , cette méthode d'approximation peut se révéler intéressante, du moins pour une première recherche de nos solutions. Comme nous l'avons signalé plus haut, il faudra de toute manière améliorer la stabilité de la méthode utilisée avant de penser à la précision.

Après avoir trouvé une solution pour le cas $n_1 = 0 = n_0$, nous nous sommes attaqués au cas $n_1 > 1$, toujours pour $n_0 = 0$ et sous l'hypothèse $d_0 = 0$. A nouveau, la précision sur A_1 s'avère exécrable, mais nous pouvons néanmoins en déduire l'existence de solutions :

n_1	a_0	d_0	d_1	A_1	$ \chi_1 ^2$
1	0.290645306951	0	1.232444473768673	$-1.4593 \cdot 10^{-5}$	1.783003828195195
2	0.355036	0	1.590421638078222	$1.5560 \cdot 10^{-6}$	3.138638326057467

Nous avons représenté ces deux solutions au figures 7.11 et 7.12. Il semble donc possible de rechercher des solutions pour l'ordre $k = 1$ quand $n_0 = 0$.

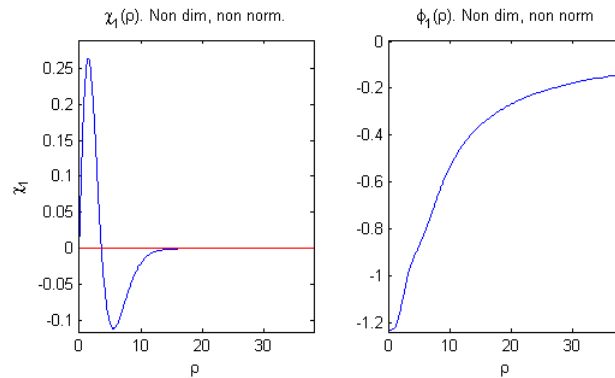


FIGURE 7.11 – Intégration numérique pour l'ordre $k = 1$ (solution $n_1 = 1$). L'image de gauche nous montre que χ_1 tend bien vers 0 à l'infini. Le potentiel ϕ_1 tend bien vers 0 car $A_1 = -1.4593 \cdot 10^{-5}$.

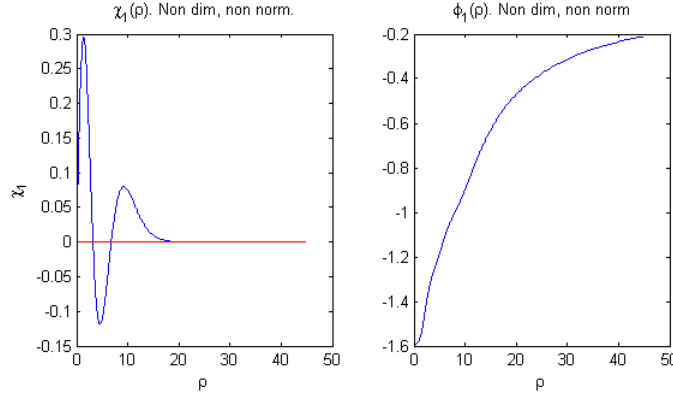


FIGURE 7.12 – Intégration numérique pour l'ordre $k = 1$ (solution $n_1 = 2$). L'image de gauche nous montre que χ_1 tend bien vers 0 à l'infini. Le potentiel ϕ_1 tend bien vers 0 car $A_1 = 1.5560 \cdot 10^{-6}$.

Pour l'ordre k=2 :

Voyons ce qu'il en est pour l'ordre $k = 2$. Pour ce faire, nous injectons le potentiel V_0 (solution $n_0 = 0$) et V_1 (solution $n_1 = 0$) dans les équations de Schrödinger-Newton pour l'ordre 2. En dehors de leurs intervalles d'intégration, nous avons vu que ces potentiels peuvent être approximés par des fonctions en $1/\rho$. Comme précédemment, nous devons trouver un jeu de paramètres $b_0 = S_2''(0)$ et $e_1 = V_2(0)$ qui fait converger S_2 et V_2 vers 0.

Malheureusement, il ne semble pas possible d'annuler A_2 en modifiant nos deux paramètres d_0 et e_1 . Cela tient peut-être au fait que notre méthode de recherche de solution n'est pas stable. Mais il se peut également que l'hypothèse de continuité imposée sur V_2 soit trop forte. Il est possible qu'il faille introduire la condition initiale e_0 dans notre étude numérique. A ce stade, nous ne pouvons que supputer et remettre cette recherche numérique à de futures études.

Conclusion provisoire

Cette étude numérique s'est avérée bien plus complexe que ce que nous attendions ; nous n'en sommes donc pas arrivés au bout. De plus, il sera nécessaire de stabiliser la méthode utilisée avant de pouvoir continuer à rechercher des solutions.

Il faudra également développer un algorithme pour trouver ces solutions. Pour le moment, les paramètres optimaux sont trouvés via une méthode d'essai-erreur qui se révèle longue et qui nécessite d'être répétée pour chaque nouvelle solution. Ainsi, le temps nous a manqué pour rechercher les solutions associées à $n_0 > 0$.

Avant de refermer ce chapitre sur ce triste constat, voyons les conclusions que nous pouvons tirer de nos premiers résultats. Nous avons trouvé trois solutions à l'ordre $k = 1$ associées à $n_0 = 0$. Ces trois solutions sont associées à des normes croissantes. Or nous savons que la norme totale se calcule par :

$$\|\Psi\|^2 \sum_{k=0}^{\infty} (2k+1) \|\chi_k\|^2 = \|\chi_0\|^2 + 3\|\chi_1\|^2 + \dots$$

Cette norme totale sera donc également de plus en plus grande lorsque n_1 augmente. Ce qui signifie que l'énergie normalisée sera à chaque fois plus élevée :

n_1	norme totale = $\ \chi_0\ ^2 + 3\ \chi_1\ ^2$	Energie normalisée (voir (7.8))
0	5.299250436441351	-0.037950752589997
1	8.967736849810535	-0.013252065372869
2	13.034640343397349	-0.006272651743802

L'énergie la plus faible sera donc encore une fois associée au cas $n_1 = 0$. Pourtant la fonction d'onde de cet état est différente de l'état «*collapsé*» habituel. En effet, pour χ_1 le maximum de probabilité se situe à un certain rayon $\tilde{\rho}$ non nul (voir figure 7.5), ce qui correspondrait à une particule en orbite autour de l'origine. Ainsi, l'ajout de moment cinétique nous mène vers des systèmes en orbite, comme nous le pensions.

L'état d'une particule avec du moment cinétique, c'est-à-dire avec du spin, se compose donc de plusieurs états propres ; le premier étant l'état «*collapsé*» où le maximum de probabilité se trouve en l'origine et le second correspondant à une particule en orbite. Bien entendu, rien ne nous prouve pour le moment que cette solution soit la plus stable ; il nous faudra d'abord considérer les solutions pour $n_0 > 0$ avant de le certifier.

Conclusions et perspectives

Nous avons, tout au long de ce mémoire, tenté d'intéresser le lecteur à la problématique de la mécanique quantique. Nous avons ainsi passé en revue les curiosités de cette théorie plus mathématique que physique ; tout d'abord en détaillant ses postulats, ensuite en présentant quelques expériences connues. Nous avons également insisté sur les différences existant entre les phénomènes quantiques et notre perception habituelle du monde.

Par la suite, nous nous sommes concentrés sur le problème de la décohérence des objets macroscopiques. Nous avons suivi l'idée relativiste de Penrose selon laquelle cette décohérence serait engendrée par la masse des particules. Penrose introduisit de nouvelles équations en lieu et place de l'équation de Schrödinger pour ajouter des auto-interactions gravitationnelles aux systèmes quantiques. Nos études numériques ont par la suite prouvé que cette hypothèse était digne d'intérêt.

En effet, lorsque nous avons étudié ces équations, dites de Schrödinger-Newton, pour une seule particule, nous avons constaté qu'une particule quantique se comporte presque comme une particule libre soumise à l'équation de Schrödinger. Nous en concluons que les auto-interactions n'induisent pas de décohérence à l'échelle quantique et sont donc négligeables.

Pour les objets macroscopiques par contre, les auto-interactions gravitationnelles entraînent le collapse de la fonction d'onde. Les objets à notre échelle sont donc en parfaite décohérence et complètement localisés. Nous avons même obtenu un ordre de grandeur intermédiaire qui semble faire la jonction entre les mondes macroscopiques et microscopiques. De fait, les particules d'une masse comparable à un virus devraient présenter des comportements quantiques mais avec une légère décohérence. Il semble alors possible de confirmer (ou d'infirmer) ces résultats par une étude expérimentale sur des particules de l'ordre du virus.

La partie suivante fut consacrée à une étude inédite des équations de Schrödinger-Newton pour deux particules. Nous y avons considéré deux expressions des équations, qui nous rendent des résultats quelque peu différents. La première expression est un découplage des équations de Schrödinger-Newton selon le centre de masse. Cette méthode semble mener à une cohérence accrue par rapport au cas à une particule. Deux particules interagissant étaleraient le pic de probabilité et donc la zone spatiale où il sera possible d'observer les particules.

La deuxième expression provient de la formulation de Diosi des équations de Schrödinger-Newton ; formulation à laquelle nous avons ajouté avec une décomposition selon les états de chaque particule. Cette méthode n'a été étudiée que pour deux particules de masses égales et semble mener, cette fois-ci, à une décohérence accrue. Avec cette formulation des équations, l'interaction entre les deux particules accélère la décohérence en abaissant l'énergie du système.

Dans la dernière partie de ce mémoire, nous avons voulu relaxer l'hypothèse de la symétrie sphérique et étudier le cas général des équations de Schrödinger-Newton. Les équations reflètent alors la cinétique de rotation inhérente aux systèmes et nous avons pu trouver des solutions autorisant une particule en rotation. Nous n'avons qu'à peine entamé cette étude car elle nécessite une approche différente de celle utilisée dans ce mémoire.

Nos résultats sont certes intéressants, mais également bien maigres comparés à ce qu'il reste à accomplir. Tout d'abord nos hypothèses sont très fortes et restreignent l'application pratique et l'interprétation de ces résultats.

Il serait par exemple intéressant d'étudier les équations dans le cas non stationnaire, ce qui a déjà été

fait pour une particule dans d'autres papiers. Nous pourrions également considérer des objets étendus au lieu de particules ponctuelles ; cette suggestion prend tout son sens lorsqu'on étudie des objets dont la masse est de l'ordre du kilo. Ensuite, il ne faut pas oublier que certaines de nos hypothèses portent sur les conditions initiales des intégrations numériques ; les modifier changera l'ordre de grandeur des solutions trouvées. Enfin, cette étude s'est basée sur des particules libres, soumises exclusivement à leurs auto-interactions. Nous pourrions ajouter des interactions inter-particules classiques comme la gravitation ou l'électromagnétisme.

Toutes ces suggestions nous rapprocheraient des systèmes physiques mais rajouteraient inévitablement de la complexité aux équations.

Annexes

Annexe A

Décomposition selon le centre de masse

Nous avons repris ci-dessous les calculs nécessaires à l'intégration numérique des équations de Schrödinger-Newton à deux particules décomposées selon le centre de masse (voir section 6.1).

Enlever les unités

Nous réécrivons ci-dessous les équations de Schrödinger-Newton (6.4) et (6.5), avec l'expression stationnaire entre crochets, en ajoutant des étoiles pour signaler que ces grandeurs portent des unités :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{R^*}^2 + M\Phi_R^* \right) \Psi_R^* = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t^*} + \Lambda^* \right) \Psi_R^* \{= E_R^* \Psi_R^*\} \\ \nabla_{R^*}^2 \Phi_R^* = 4\pi G M |\Psi_R^*|^2 \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{s^*}^2 + \mu\Phi_s^* \right) \Psi_s^* = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t^*} - \Lambda^* \right) \Psi_s^* \{= E_s^* \Psi_s^*\} \\ \Phi_s^*(s, t) = \Phi_R^*(R = s, t) + \phi_s^*(s, t) \\ \nabla_{s^*}^2 \phi_s^* = 4\pi G \mu |\Psi_s^*|^2 \end{array} \right. \quad (\text{A.1})$$

A nouveau, ce système présente une invariance d'échelle :

$$\begin{aligned} (\Psi_{R/s}^*, \Phi_{R/s}^*, \phi_s^*, E_{R/s}^*, \Lambda^*) &\rightarrow \sigma^2 (\Psi_{R/s}^*, \Phi_{R/s}^*, \phi_s^*, E_{R/s}^*, \Lambda^*) \\ (R^*, s^*) &\rightarrow \sigma^{-1} (R^*, s^*) \\ t^* &\rightarrow \sigma^{-2} t^* \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

où $\sigma \in \mathbb{R}$. On ne supposera pas forcément que $\Psi^*(R^*, s^*, t^*)$ est normalisable, il faudra donc contrôler cette valeur et, au besoin, ajuster le système grâce à σ . De fait, l'effet de σ sur les normes est :

$$\begin{aligned} \|\Psi_{R/s}^*\|^2 &\rightarrow \sigma \|\Psi_{R/s}^*\|^2 \\ \|\Psi^*\|^2 = \|\Psi_R^*\|^2 + \|\Psi_s^*\|^2 &\rightarrow \sigma^2 \|\Psi^*\|^2 \end{aligned}$$

Nous aimerions maintenant ré-exprimer notre système (A.1) sans unité. Inspirons nous de la mise à l'échelle réalisée pour une particule (voir (5.3) page 40) pour imposer la forme de notre système sans unité :

$$\left\{ \begin{array}{l} (-\nabla_R^2 + \Phi_R) \Psi_R = \left(i \frac{\partial}{\partial t} + \Lambda \right) \Psi_R \{ = E_R \Psi_R \} \\ \nabla_R^2 \Phi_R = |\Psi_R|^2 \\ \left(-\frac{M}{\mu} \nabla_s^2 + \frac{\mu}{M} \Phi_s \right) \Psi_s = \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \Lambda \right) \Psi_s \{ = E_s \Psi_s \} \\ \Phi_s(s, t) = \Phi_R(R = s, t) + \phi_s(s, t) \\ \nabla_s^2 \phi_s = \frac{\mu}{M} |\Psi_s|^2 \end{array} \right. \quad (\text{A.3})$$

On demande en plus que les normes sur Ψ_R et Ψ_s soient conservées lors de cette mise à l'échelle. Le redimensionnement suivant permet de remplir ces conditions :

$$\left\{ \begin{array}{llll} R & = & \delta R^* & \text{avec } \delta = \frac{8\pi G M^3}{\hbar^2} \left[\frac{1}{\mathbf{m}} \right] \\ s & = & \delta s^* & \\ \Psi_{R/s} & = & \alpha \Psi_{R/s}^* & \text{avec } \alpha = \sqrt{\frac{1}{\delta^3}} \left[\sqrt{\mathbf{m}^3} \right] \\ \Phi_{R/s} & = & \beta \Phi_{R/s}^* & \text{avec } \beta = \frac{1}{4\pi G M \delta} \left[\frac{s^2}{\mathbf{m}^2} \right] \\ \phi_s & = & \beta \phi_s^* & \\ E_{R/s} & = & \epsilon E_{R/s}^* & \text{avec } \epsilon = \frac{\beta}{M} \left[\frac{s^2}{kg \mathbf{m}^2} \right] \\ \Lambda & = & \epsilon \Lambda^* & \\ t & = & \gamma t^* & \text{avec } \gamma = \frac{1}{\hbar \epsilon} \left[\frac{1}{s} \right] \end{array} \right. \quad (\text{A.4})$$

En pratique, nous allons résoudre numériquement les équations (A.3). Quand nous aurons trouvé les solutions Ψ_R et Ψ_s , nous pourrons calculer $\|\Psi\|^2$ et normaliser les équations.

Equations stationnaires et symétrie sphérique

Reprenons les équations dans le cas stationnaire en y introduisant les notations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} S_R = \Psi_R \\ V_R = E_R - \Phi_R \\ S_s = \Psi_s \\ V_s = E_s - \frac{\mu}{M} \phi_s \end{array} \right. \quad (\text{A.5})$$

Pour retrouver les énergies, il faudra étudier $V_{R/s}(\infty)$ puisque les potentiels s'annulent à grande distance. [HYPOTHÈSE] On va également supposer que les fonctions d'états S_R et S_s sont réelles.

Les équations (A.3) deviennent alors :

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_R^2 S_R = -S_R V_R \\ \nabla_R^2 V_R = -S_R^2 \\ \nabla_s^2 S_s = -c S_s (V_s - c \Phi_{R=s}) \\ \nabla_s^2 V_s = -(c S_s)^2 \end{array} \right. \quad (\text{A.6})$$

où $c = \frac{\mu}{M}$ et $\Phi_{R=s}$ signifie $\Phi_R(R = s)$.

A nouveau, nous allons considérer le cas de la symétrie sphérique où seuls les rayons ρ_R , ρ_s nous intéressent. On peut alors réécrire les équations de Schrödinger-Newton comme :

$$\left\{ \begin{array}{l} (\rho_R S_R)'' = -\rho_R S_R V_R \\ (\rho_R V_R)'' = -\rho_R S_R^2 \\ (\rho_s S_s)'' = -\rho_s c S_s (V_s - c\Phi_{R=s}) \\ (\rho_s V_s)'' = -\rho_s (c S_s)^2 \end{array} \right. \quad (\text{A.7})$$

ou encore

$$\left\{ \begin{array}{l} (\rho_R^2 S_R')' = -\rho_R^2 S_R V_R \\ (\rho_R^2 V_R')' = -\rho_R^2 S_R^2 \\ (\rho_s^2 S_s')' = -\rho_s^2 c S_s (V_s - c\Phi_{R=s}) \\ (\rho_s^2 V_s')' = -\rho_s^2 (c S_s)^2 \end{array} \right. \quad (\text{A.8})$$

où le $()'$ dénote une dérivation par rapport au rayon. Le calcul de la norme se simplifie également en :

$$\| S_{R/s} \|^2 = 4\pi \int \rho^2 S_{R/s}^2 d\rho$$

Nous étudierons le système (A.7). Sous cette expression, les équations pour la particule fictive seront sensibles au facteur c et à l'influence de Φ_R . Il est déjà possible de comprendre les limites d'un tel système. En effet, le facteur c prend en compte l'effet des masses et permet de connaître l'importance relative des fonctions du centre de masse par rapport à celles de la particule fictive. Mais si ce facteur devient trop important, ou trop faible, il va mal conditionner les équations, et celles-ci vont se révéler difficile à intégrer numériquement.

Résultats analytiques

Il est possible de ré-exprimer le système (A.7) en intégrant (A.7) et (A.8) :

$$\left\{ \begin{array}{l} S_R(\rho) = S_{R_0} - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) S_R(\tau) V_R(\tau) d\tau \\ V_R(\rho) = V_{R_0} - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) S_R^2(\tau) d\tau \\ S_s(\rho) = S_{s_0} - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) c S_s(\tau) (V_s(\tau) - c\Phi_{R=s}(\tau)) d\tau \\ V_s(\rho) = V_{s_0} - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) (c S_s(\tau))^2 d\tau \end{array} \right.$$

où $S_{R/s_0} = S_{R/s}(0)$, $V_{R/s_0} = V_{R/s}(0)$. Ces dernières sont les conditions initiales à fournir pour pouvoir commencer l'intégration. Les équations du centre de masse (voir (A.7)) se résument à des équations de Schrödinger-Newton pour une particule, nous les traiterons comme précédemment : V_{R_0} sera fixé à 1 et les valeurs de S_{R_0} qui rendent des solutions stationnaires nous sont alors connues.

En ce qui concerne les équations de la particule fictive, le problème est plus complexe. En réécrivant ces équations sous la forme suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} (\rho_s S_s)'' = -\rho_s c S_s K \\ (\rho_s V_s)'' = -\rho_s (c S_s)^2 \end{array} \right. \quad (\text{A.9})$$

avec $K = V_s - c\Phi_{R=s}$, on peut en tirer une analyse similaire au cas à une particule. Le cas $S_{s_0} = 0$ ne sera bien entendu pas intéressant. De même, on peut se restreindre à l'analyse des S_{s_0} positifs puisque les équations sont invariantes par changement de signe sur S . En ce qui concerne la fonction V_s , elle sera décroissante car

$$V_s'(\rho) = -\frac{1}{\rho^2} \int_0^\rho \tau^2 c^2 S_s^2(\tau) d\tau$$

En regardant les équations (A.9), on se rend compte que la fonction $\rho S_s(\rho)$ sera oscillante tant que $K(\rho)$ est positive. Quand $K(\rho)$ passe dans les négatifs, $\rho S_s(\rho)$ devient alors exponentielle. Autrement dit, nous devons fournir une valeur initiale $K(0) > 0$, c'est-à-dire $V_{s_0} > c\Phi_{R=s}(0)$, pour avoir une chance de trouver des solutions normalisables.

En pratique, n'importe quel choix de $V_{s_0} > c\Phi_{R=s}(0)$ semble convenir dans la recherche de solutions

stationnaires. Notre problème, à ce stade, c'est qu'il ne nous est plus permis de fixer V_{s_0} comme bon nous semble. En effet, nous n'avons qu'une seule normalisation (A.2) portant sur les 4 fonctions $S_{R/s}, V_{R/s}$, ce qui signifie que nous ne pouvons imposer qu'une seule condition initiale : V_{R_0} . Théoriquement, rien ne nous permet de fixer V_{s_0} .

[HYPOTHÈSE] Mais nous ne pouvons pas nous permettre d'étudier le continuum $V_{s_0} \in]0, \infty[$; nous allons donc imposer arbitrairement $K(0) = 1$, c'est-à-dire $V_{s_0} = 1 + c\Phi_{R=s}(0)$.

Une fois qu'on obtient des solutions normalisables, les énergies se calculent grâce à une expansion de $V_{R/s}$ selon ρ^{-1} :

$$V_{R/s}(\rho) = A_{R/s} + \frac{B_{R/s}}{\rho} + \dots \quad \text{et donc} \quad E_{R/s} = V_{R/s}(\infty) = A_{R/s}$$

$$\text{où} \quad A_R = V_{R_0} - \int_0^\infty \tau S_R^2(\tau) d\tau, \quad B_R = \int_0^\infty \tau^2 S_R^2(\tau) d\tau$$

$$\text{et où} \quad A_s = V_{s_0} - \int_0^\infty \tau (cS_s)^2(\tau) d\tau, \quad B_s = \int_0^\infty \tau^2 (cS_s)^2(\tau) d\tau$$

Résultats numériques

[HYPOTHÈSE] Pour le caractère lisse des fonctions, on impose $\Psi'_{R/s}(0) = \Phi'_{R/s}(0) = \phi'_s(0) = 0$ et donc $S'_{R/s}(0) = V'_{R/s}(0) = 0$.

L'intervalle d'intégration va de $\rho = 0$ à un certain ρ_{\max} . Mais les intégrateurs numériques ne peuvent pas gérer les équations en $\rho = 0$. Il faut faire une intégration à partir de $\rho = \rho_{init}$ au lieu de $\rho = 0$. Les valeurs de S et V en ρ_{init} doivent être approximées. Cette approximation peut être obtenue par une expansion en série autour de $\rho = 0$ ¹ :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} S_R(\rho) & = & S_{R_0} - \frac{\rho^2}{6} S_{R_0} V_{R_0} + \frac{\rho^4}{120} S_{R_0} (S_{R_0}^2 + V_{R_0}^2) + \dots \\ V_R(\rho) & = & V_{R_0} - \frac{\rho^2}{6} S_{R_0}^2 + \frac{\rho^4}{60} V_{R_0} S_{R_0}^2 + \dots \\ S_s(\rho) & = & S_{s_0} - \frac{\rho^2}{6} c S_{s_0} k + \frac{\rho^4}{120} c^2 S_{s_0} (cS_{s_0}^2 + k^2 + S_{R_0}^2) + \dots \\ V_s(\rho) & = & V_{s_0} - \frac{\rho^2}{6} c^2 S_{s_0}^2 + \frac{\rho^4}{60} c^3 k S_{s_0}^2 + \dots \end{array} \right.$$

où $k = V_{s_0} - c \Phi_{R_0}$. Comme condition finale, nous imposerons bien entendu que $S_{R/s} \rightarrow 0$ quand $\rho \rightarrow \infty$. Nous sommes à présent parés pour intégrer les équations.

Puisque nous avons étudié les équations de Schrödinger-Newton pour une particule, nous connaissons déjà les solutions stationnaires pour le centre de masse. A partir de là, on trouve facilement Φ_R . Il ne nous reste qu'à intégrer les équations pour la particule fictive, modélisées suivant :

$$A = [S_s, X_s, V_s, Y_s] \text{ où } X_s = (\rho S_s)', Y_s = (\rho V_s)'$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A(1)' = \frac{A(2) - A(1)}{\rho} \\ A(2)' = -\rho c A(1) (A(3) - c \Phi_{R=s}) \\ A(3)' = \frac{A(4) - A(3)}{\rho} \\ A(4)' = -\rho (c A(1))^2 \end{array} \right.$$

Nous utiliserons la méthode intuitive pour rechercher la valeur de S_{s_0} (lorsque $V_{s_0} = 1 + c\Phi_{R=s}(0)$) qui rend une solution stationnaire. Les résultats numériques sont présentés dans la section 6.1, page 58.

1. Les dérivées de S et V en $\rho = 0$ sont obtenues par des dérivations successives de (A.7).

Annexe B

Décomposition selon les particules

Nous avons repris ci-dessous les calculs nécessaires à l'intégration numérique des équations de Schrödinger-Newton à deux particules, proposées par Diosi et décomposées selon les particules (voir section 6.2).

Enlever les unités

Comme précédemment, nous réécrivons les équations de Schrödinger-Newton (6.9), en notant l'expression stationnaire entre crochets et en ajoutant des étoiles aux grandeurs dimensionnées. Nous abandonnons également la distinction entre r_1 et r_2 puisqu'elle n'intervient plus dans les équations.

$$\left\{ \begin{array}{l} -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_{r^*}^2 \Psi_1^* + m_1 \Phi^* \Psi_1^* = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t^*} - \Lambda^* \right) \Psi_1^* \quad \{= E_1^* \Psi_1^*\} \\ -\frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_{r^*}^2 \Psi_2^* + m_2 \Phi^* \Psi_2^* = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t^*} + \Lambda^* \right) \Psi_2^* \quad \{= E_2^* \Psi_2^*\} \\ \nabla_{r^*}^2 \Phi^* = 4\pi G(m_1 |\Psi_1^*|^2 + m_2 |\Psi_2^*|^2) \end{array} \right.$$

La somme des énergies E_1 et E_2 nous donnera alors l'énergie totale E . L'invariance d'échelle de ce système est :

$$\begin{aligned} (\Psi_{1/2}^*, \Phi^*, E_{1/2}^*, \Lambda^*) &\rightarrow \sigma^2 (\Psi_{1/2}^*, \Phi^*, E_{1/2}^*, \Lambda^*) \\ r^* &\rightarrow \sigma^{-1} r^* \\ t^* &\rightarrow \sigma^{-2} t^* \end{aligned}$$

dont l'influence sur la norme est

$$\|\Psi\|^2 \rightarrow \sigma \|\Psi\|^2$$

Cette invariance nous permettra de normaliser les solutions. Attention toutefois que cette fois-ci nous avons supposé que Ψ_1 et Ψ_2 étaient toutes les deux normalisées.

Nous allons maintenant enlever les unités de ce système. Pour ce faire, on applique le changement de variable suivant qui conserve les normes :

$$\left\{ \begin{array}{lll} r & = & \delta r^* \quad \text{avec } \delta = \frac{8\pi G m_1^3}{\hbar^2} \left[\frac{1}{\mathbf{m}} \right] \\ \Psi_{1/2} & = & \alpha \Psi_{1/2}^* \quad \text{avec } \alpha = \sqrt{\frac{1}{\delta^3}} \left[\sqrt{\mathbf{m}^3} \right] \\ \Phi & = & \beta \Phi^* \quad \text{avec } \beta = \frac{1}{4\pi G m_1 \delta} \left[\frac{s^2}{\mathbf{m}^2} \right] \\ E_{1/2} & = & \epsilon E_{1/2}^* \quad \text{avec } \epsilon = \frac{\beta}{m_1} \left[\frac{s^2}{kg \mathbf{m}^2} \right] \\ \Lambda & = & \epsilon \Lambda^* \\ t & = & \gamma t^* \quad \text{avec } \gamma = \frac{1}{\hbar \epsilon} \left[\frac{1}{s} \right] \end{array} \right. \quad (\text{B.1})$$

Nous travaillerons donc à partir du système

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla_r^2 \Psi_1 + \Phi \Psi_1 = \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \Lambda \right) \Psi_1 \quad \{ = E_1 \Psi_1 \} \\ -\frac{1}{\eta} \nabla_r^2 \Psi_2 + \eta \Phi \Psi_2 = \left(i \frac{\partial}{\partial t} - \Lambda \right) \Psi_2 \quad \{ = E_2 \Psi_2^* \} \\ \nabla_r^2 \Phi = (|\Psi_1|^2 + \eta |\Psi_2|^2) \end{array} \right. \quad (\text{B.2})$$

Equations stationnaires et symétrie sphérique

Reprenons les équations stationnaires et posons

$$\left\{ \begin{array}{l} S_1 = \Psi_1 \\ S_2 = \Psi_2 \\ V_1 = E_1 - \Phi \\ V_2 = E_2 - \Phi \end{array} \right.$$

Nous obtenons alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla_r^2 S_1 = -V_1 S_1 \\ \nabla_r^2 S_2 = -\eta^2 V_2 S_2 \\ \nabla_r^2 V_1 = -(|S_1|^2 + \eta |S_2|^2) \\ \nabla_r^2 V_2 = -(|S_1|^2 + \eta |S_2|^2) \end{array} \right.$$

En symétrie sphérique, les équations de Schrödinger-Newton deviennent

$$\left\{ \begin{array}{l} (\rho S_1)'' = -\rho V_1 S_1 \\ (\rho S_2)'' = -\rho \eta^2 V_2 S_2 \\ (\rho V_1)'' = -\rho(|S_1|^2 + \eta |S_2|^2) \\ (\rho V_2)'' = -\rho(|S_1|^2 + \eta |S_2|^2) \end{array} \right. \quad (\text{B.3})$$

ou encore

$$\left\{ \begin{array}{l} (\rho^2 S_1')' = -\rho^2 V_1 S_1 \\ (\rho^2 S_2')' = -\rho^2 \eta^2 V_2 S_2 \\ (\rho^2 V_1')' = -\rho^2(|S_1|^2 + \eta |S_2|^2) \\ (\rho^2 V_2')' = -\rho^2(|S_1|^2 + \eta |S_2|^2) \end{array} \right. \quad (\text{B.4})$$

Et le calcul de la norme devient : $\|\Psi_{1/2}\|^2 = 4\pi \int \rho^2 S_{1/2}^2 d\rho$.

Résultats analytiques

Les expressions (B.3) et (B.4) nous permettent d'exprimer les fonctions $S_{1/2}$ et $V_{1/2}$ comme :

$$\begin{cases} S_1(\rho) = S_{1_0} - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) S_1(\tau) V_1(\tau) d\tau \\ V_1(\rho) = V_{1_0} - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) (S_1^2 + \eta S_2^2(\tau)) d\tau \\ S_2(\rho) = S_{2_0} - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) \eta^2 S_2(\tau) V_2(\tau) d\tau \\ V_2(\rho) = V_{2_0} - \int_0^\rho \left(\tau - \frac{\tau^2}{\rho} \right) (S_1^2 + \eta S_2^2(\tau)) d\tau \end{cases}$$

où $S_{1/2_0} = S_{1/2}(0)$, $V_{1/2_0} = V_{1/2}(0)$ sont les conditions initiales à fixer.

Les équations (B.3) sont invariantes si S_1 ou S_2 change de signe. On peut donc se restreindre à l'étude de $S_{1/2_0}$ positifs, le cas nul étant bien sûr rejeté. Les fonctions $V_{1/2}$ seront décroissantes car

$$V'_{1/2}(\rho) = -\frac{1}{\rho^2} \int_0^\rho \tau^2 (S_1^2(\tau) + \eta S_2^2(\tau)) d\tau$$

De plus, le système (B.3) nous dit que $(\rho S_{1/2})$ sera oscillante tant que $V_{1/2} > 0$ et exponentielle quand $V_{1/2} < 0$. Autrement dit, pour trouver des solutions convergentes, il nous faudra des conditions initiales $V_{1/2_0} > 0$.

[NB] Dans les résultats de la section 6.2 sur la décomposition selon les particules, nous n'étudierons que le cas de masses égales, c'est-à-dire $\eta = 1$. Dans ce cas, les équations sont totalement symétriques :

$$\begin{cases} (\rho S_1)'' = -\rho V_1 S_1 \\ (\rho S_2)'' = -\rho V_2 S_2 \\ (\rho V_1)'' = -\rho(|S_1|^2 + |S_2|^2) \\ (\rho V_2)'' = -\rho(|S_1|^2 + |S_2|^2) \end{cases} \quad (\text{B.5})$$

Nous aurons donc $V_2 = V_1$, $E_1 = E_2$, $\Psi_1 = \Psi_2$, $S_{1_0} = S_{2_0}$. Si on réécrit les équations en omettant les indices, on trouve un système comparable au cas à une particule où seul un facteur 2 intervient sur la fonction V :

$$\begin{cases} (\rho S)'' = -\rho V S \\ (\rho V)'' = -2\rho |S|^2 \end{cases}$$

Finalement, nous fixerons $V_{1_0} = V_{2_0} = 1$, puisque la normalisation nous le permet, et chercherons quelles valeurs de $S_{1_0} = S_{2_0}$ nous rendront des solutions stationnaires. Les solutions sont étudiées dans les résultats de la section 6.2.

Après cette parenthèse, reprenons nos développements pour n'importe quelles masses. Pour le calcul des énergies, nous utilisons une expansion pour $V_{1/2}$:

$$V_{1/2}(\rho) = A_{1/2} + \frac{B_{1/2}}{\rho} + \dots \quad \text{et donc} \quad \begin{aligned} E_1 &= V_1(\infty) = A_1 \\ E_2 &= \eta V_2(\infty) = \eta A_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{où} \quad A_{1/2} &= V_{1/2_0} - \int_0^\infty \tau (S_1^2(\tau) + \eta S_2^2(\tau)) d\tau, \\ B_{1/2} &= \int_0^\infty \tau^2 (S_1^2(\tau) + \eta S_2^2(\tau)) d\tau \end{aligned}$$

Résultats numériques

Imposons encore que $V'_{1/2}(0) = 0$ et $S'_{1/2}(0) = 0$ pour garder le caractère lisse. Il ne nous reste qu'à exprimer nos fonctions en ρ_{init} :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} S_1(\rho) & = & S_{1_0} - \frac{\rho^2}{6} S_{1_0} V_{1_0} + \frac{\rho^4}{120} S_{1_0} (S_{1_0}^2 + V_{1_0}^2 + \eta S_{2_0}^2) + \dots \\ S_2(\rho) & = & S_{2_0} - \frac{\rho^2}{6} \eta^2 S_{2_0} V_{2_0} + \frac{\rho^4}{120} \eta^2 S_{2_0} (S_{1_0}^2 + \eta^2 V_{2_0}^2 + \eta S_{2_0}^2) + \dots \\ V_1(\rho) & = & V_{1_0} - \frac{\rho^2}{6} (S_{1_0}^2 + \eta S_{2_0}^2) + \frac{\rho^4}{60} (S_{1_0}^2 V_{1_0} + \eta^3 S_{2_0}^2 V_{2_0}) + \dots \\ V_2(\rho) & = & V_{2_0} - \frac{\rho^2}{6} (S_{1_0}^2 + \eta S_{2_0}^2) + \frac{\rho^4}{60} (S_{1_0}^2 V_{1_0} + \eta^3 S_{2_0}^2 V_{2_0}) + \dots \end{array} \right.$$

Nous utilisons alors la modélisation suivante pour intégrer nos équations :

$$A = [S_1, X_1, V_1, Y_1, S_2, X_2, V_2, Y_2] \text{ où } X_{1/2} = (\rho S_{1/2})', Y_{1/2} = (\rho V_{1/2})'.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A(1)' = \frac{A(2) - A(1)}{\rho} \\ A(2)' = -\rho A(1) A(3) \\ A(3)' = \frac{A(4) - A(3)}{\rho} \\ A(4)' = -\rho (A(1)^2 + \eta A(5)^2) \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} A(5)' = \frac{A(6) - A(5)}{\rho} \\ A(6)' = -\rho \eta^2 A(5) A(7) \\ A(7)' = \frac{A(8) - A(7)}{\rho} \\ A(8)' = -\rho (A(1)^2 + \eta A(5)^2) \end{array} \right.$$

Nous avons donc lancé l'intégration pour rechercher les solutions dans le cas de masses égales. Les résultats sont fournis à la section 6.2, page 70.

Bibliographie

- [1] R. Feynman, R. Leighton, M. Sands - *Mécanique Quantique* - InterEditions, Paris (1992)
Chapitre 1 pp.1-15.
- [2] Hitachi, Double-slit experiment
<http://www.hitachi.com/rd/research/em/doubleslit.html>
Consulté le 12/04/2011.
- [3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë - *Mécanique Quantique I* - Hermann, Paris (1996)
Chapitre III pp.213-266.
- [4] L. Debnath, P. Mikusinski - *Introduction to Hilbert Spaces* - Elsevier Academic Press, Amsterdam (2005). Chapitre 7 pp.351-393.
- [5] G. Auletta - *Foundations and interpretation of Quantum Mechanics* - World Scientific, Singapore (2009).
- [6] Rafael de la Madrid - *The role of the rigged Hilbert space in Quantum Mechanics* - Eur. J. Phys. **26** (2005) 287-312.
- [7] A. Füzfa. - *Cours de Compléments de Mathématiques* - SMATB333, FUNDP (2011).
- [8] R. Penrose - *The road to reality* - Vintage Books, USA (2007).
pp.846-856.
- [9] R. Penrose, I. Moroz, P. Tod - *Spherically-symmetric solutions of the Schrödinger-Newton equations* - Class. Quantum Grav. **15** (1998) 2733-2742.
- [10] R. Harrison - *A numerical study of the Schrödinger-Newton equations* - Phd thesis - University of Oxford (2001).
R. Harrison, I. Moroz, P. Tod - *A numerical study of the Schrödinger-Newton equations* - Nonlinearity **16** (2003) 101-122.
- [11] P. Tod, I. Moroz - *An analytical approach to the Schrödinger-Newton equations* - Nonlinearity **12** (1999) 201-216.
- [12] R. Penrose - *The emperor's new mind* - Oxford University Press (1990).
- [13] E. Prugivecki - *Quantum mechanics in Hilbert space, second edition* - Dover publications inc. (2006).
- [14] D. R. Lide (éditeur) - *Handbook of chemistry and physics* - 89ème édition, CRC press (2009).

- [15] S. Adler - *Comments on Proposed Gravitational Modifications of Schrödinger Dynamics and their Experimental Implications* - J.Phys.A40 : 755-764 (2007)
- [16] A. Messiah - *Quantum Mechanics, Volume I* - North Holland (1991).
pp.195-196, 344-355.
- [17] J.R. Van Meter - *Schrödinger-Newton "collapse" of the wave function.* - Class. Quantum Grav. **28**
(2011) 215013